Análise de Dados Agilent OpenLAB

Primeiros Passos

Agilent Technologies

Avisos

© Agilent Technologies, Inc. 2012, 2013

No se permite la reproducción de parte alguna de este manual bajo cualquier forma ni por cualquier medio (incluyendo su almacenamiento y recuperación electrónicos y la traducción a idiomas extranjeros) sin el consentimiento previo por escrito de Agilent Technologies, Inc. según lo estipulado por las leyes de derechos de autor estadounidenses e internacionales.

Número de parte del manual:

M8370-99001

Edición

10/2013

Impreso en Alemania

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

Revisão do software

Este guia é válido para a revisão A.01.02 da OpenLAB Data Analysis Agilent.

Garantía

El material contenido en este documento se proporciona "tal como es" y está sujeto a modificaciones, sin previo aviso, en ediciones futuras. Además, hasta el máximo permitido por la ley aplicable, Agilent rechaza cualquier garantía, expresa o implícita, en relación con este manual y con cualquier información contenida en el mismo, incluyendo, pero no limitado a, las garantías implícitas de comercialización y adecuación a un fin determinado. En ningún caso Agilent será responsable de los errores o de los daños incidentales o consecuentes relacionados con el suministro, utilización o uso de este documento o de cualquier información contenida en el mismo. En el caso que Agilent y el usuario tengan un acuerdo escrito aparte con condiciones de garantía que cubran el material de este documento y que estén en conflicto con estas condiciones, prevalecerán las condiciones de garantía del acuerdo escrito aparte.

Licencias sobre la tecnología

El hardware y/o software descritos en este documento se suministran bajo una licencia y pueden utilizarse o copiarse únicamente de acuerdo con las condiciones de tal licencia.

Avisos de seguridad

CUIDADO

Un aviso de **PRECAUCIÓN** indica un peligro. Llama la atención sobre un procedimiento de operación, una práctica o similar que, si no se realizan correctamente o no se ponen en práctica, pueden provocar daños en el producto o pérdida de datos importantes. No avance más allá de un aviso de **PRECAUCIÓN** hasta que se entiendan y se cumplan completamente las condiciones indicadas.

AVISO

Un aviso de ADVERTENCIA indica un peligro. Llama la atención sobre un procedimiento de operación, una práctica o similar que, si no se realizan correctamente o no se ponen en práctica, pueden provocar daños personales o la muerte. No avance más allá de un aviso de ADVERTENCIA hasta que se entiendan y se cumplan completamente las condiciones indicadas.

Apenas para fins de pesquisa

Neste Guia...

Este guia descreve a instalação da Análise de Dados OpenLAB, as etapas de configuração necessárias e os fluxos de trabalho principais. Leia este manual se deseja instalar a Análise de Dados OpenLAB ou se a deseja usar para analisar seus dados.

Tabela 1 Termos e abreviaturas usados neste documento

Termo	Descrição
ChemStation	Edição ChemStation do OpenLAB CDS
EZChrom	Edição EZChrom do OpenLAB CDS
ACAML	Linguagem de Marcação Analítica Comum Agilent

1 Introdução

Este capítulo fornece uma visão geral do software de Análise de Dados OpenLAB.

2 Instalação

Este capítulo descreve como instalar a OpenLAB Data Analysis como um complemento do OpenLAB CDS ou como um aplicativo individual. Para obter mais detalhes sobre a instalação do OpenLAB CDS, consulte os guias de instalação do CDS.

3 Configuração do Painel de controle do OpenLAB

Este capítulo descreve a configuração de projeto que é necessária como uma preparação para trabalhar com OpenLAB Data Analysis.

4 Trabalhar com a Análise de Dados OpenLAB

Este capítulo descreve as funções gerais e específicas da OpenLAB Data Analysis. Introduz a interface do usuário e inclui informações sobre dados

básicos e tratamento de métodos. Os recursos específicos incluem descrições de opções de exibição avançadas, configurações de calibração e integração.

5 Configuração para Uso Automático do OpenLAB CDS

É possível configurar o ChemStation ou o EZChrom para que possam usar a Análise de Dados OpenLAB por padrão. Este capítulo descreve a configuração necessária no ChemStation ou no EZChrom.

Conteúdo

1 Introdução 7

Sobre a Análise de Dados OpenLAB 8
Análise de Dados OpenLAB e ChemStation/EZChrom 10

2 Instalação 11

Instalar a Análise de Dados OpenLAB como um Complemento ou como um Aplicativo Individual 12

3 Configuração do Painel de controle do OpenLAB 15

Sobre Projetos 16
Criar um Projeto para Análise de Dados OpenLAB como um Aplicativo Individual 17
Criar um Projeto para o ChemStation com a Análise de Dados OpenLAB 19
Criar um Projeto para o EZChrom com a Análise de Dados OpenLAB 21
Editar projetos EZChrom existentes 23
Criar Atalhos de Projetos 24

4 Trabalhar com a Análise de Dados OpenLAB 25

Opcional: Preparação de Dados de Exemplo 26
Iniciar o Aplicativo 27
Introdução à Interface do Usuário 28
Fluxo de Trabalho Geral 35
Usar Recursos Específicos 49
Gerar um Relatório 82

5 Configuração para Uso Automático do OpenLAB CDS 87

Configurar o ChemStation para Processamento Automático com a Análise de Dados OpenLAB 88
Configurar o EZChrom para Processamento Automático com a Análise de Dados OpenLAB 90

6 Apêndice 93

Caracteres Inválidos para Nomes de Arquivo ou Caminho 94
Desinstalação da Análise de Dados OpenLAB 95

1 Introdução

Sobre a Análise de Dados OpenLAB 8
Recursos Atuais da Análise de Dados OpenLAB 8
Recursos Planejados da Análise de Dados OpenLAB 9
Análise de Dados OpenLAB e ChemStation/EZChrom 10

Este capítulo fornece uma visão geral do software de Análise de Dados OpenLAB.

Sobre a Análise de Dados OpenLAB

Recursos Atuais da Análise de Dados OpenLAB

Com a Análise de Dados OpenLAB, a Agilent introduz um novo pacote de análise de dados que proporciona uma experiência de análise de dados única! Esta versão foi projetada especialmente para análise de dados em laboratórios químicos e petroquímicos e na indústria de processamento de hidrocarbonetos.

A Análise de Dados OpenLAB apresenta uma operação intuitiva, uma revisão fácil de amostras e um reprocessamento rápido de grandes conjuntos de dados cromatográficos:

- A Análise de Dados OpenLAB foi projetada para ser fácil de usar. Esta inclui uma interface do usuário simples e intuitiva.
- As faixas de funções ao estilo da Microsoft proporcionam um acesso rápido às principais funções.

  Uma árvore de seleção de dados aprimorada permite o rápido acesso a seus dados. É possível selecionar dados de várias pastas, carregar conjuntos de resultados completos ou selecionar amostras únicas.
- A navegação de dados aprimorada com um novo conceito de visualização de dados permite sobrepor e comparar centenas de sinais. É possível trabalhar com instrumentos LC e GC ao mesmo tempo e usar vários métodos e conjuntos de dados em paralelo.
- É possível ajustar a escala automaticamente para um pico específico, ignorar picos principais ou ajustar a escala para a linha de base. Já não precisa fazer zoom em cada uma das amostras.
- É possível criar seu próprio layout e organizar sua tela para atender às suas necessidades específicas de fluxo de trabalho. Quatro layouts configuráveis pré-definidos ajudam a combinar o layout de sua tela com a tarefa que estiver realizando.
- A Análise de Dados OpenLAB proporciona um reprocessamento muito rápido (10 vezes mais rápido que o OpenLAB CDS).
- A Análise de Dados OpenLAB introduz uma ferramenta de integração de picos única, somente com um clique, para uma revisão rápida.

- A Análise de Dados OpenLAB trabalha com dados das Edições EZChrom e ChemStation, permitindo usar a mesma integração, o mesmo cálculo e a mesma calibração e geração de relatórios em seu laboratório.
- A Análise de dados OpenLAB inclui o integrador EZChrom e ChemStation para compatibilidade com versões anteriores e flexibilidade para usar a mesma integração em seu laboratório.
- É possível importar os compostos dos métodos do ChemStation e do EZChrom existentes.
- O Relatório Inteligente OpenLAB é totalmente integrado. É possível criar relatórios de Amostra, relatórios de Resumo de Sequência e relatórios de resumo de Sequência Cruzada.
- O Peak Explorer permite revisar e comparar grandes quantidades de dados com facilidade.

Recursos Planejados da Análise de Dados OpenLAB

Alguns recursos planejados para revisões futuras da Análise de dados OpenLAB:

- Suporte de dados espectrais MS, CE ou UV
- Cálculo de Adequação do Sistema
- Migração completa de métodos do EZChrom/ChemStation para métodos de processamento da Análise de dados OpenLAB
- Integração perfeita de processamento automático na Análise de Dados OpenLAB durante a aquisição (atualmente, somente por meio de macros/comandos)
- Conformidade com regulamentos como o GLP ou 21 CFR Parte 11

Análise de Dados OpenLAB e ChemStation/EZChrom

A OpenLAB Data Analysis é um produto único de análise de dados para dados LC e GC que pode ser usado em conjunto com a Edição ChemStation do OpenLAB CDS ou com a Edição EZChrom do OpenLAB CDS. O produto avalia os dados brutos e os arquivos ACAML (=Linguagem de Marcação Analítica Comum Agilent) gerados por esses sistemas. Os arquivos ACAML são gerados pela versão OpenLAB CDS A.01.01 ou superior. Para receber um arquivo ACAML que seja possível o uso com a Análise de dados OpenLAB, é necessário primeiro reprocessar os dados com a versão OpenLAB CDS A.01.01 ou superior.

Os fluxos de trabalho abrangidos pela OpenLAB Data Analysis variam desde uma revisão dos dados adquiridos e do processamento dos resultados até aos relatórios. Os relatórios são feitos com o módulo Relatórios Inteligentes que também está disponível nas Edições ChemStation e EZChrom do OpenLAB CDS.

2
Instalação

Instalar a Análise de Dados OpenLAB como um Complemento ou como um Aplicativo Individual 12

Este capítulo descreve como instalar a OpenLAB Data Analysis como um complemento do OpenLAB CDS ou como um aplicativo individual. Para obter mais detalhes sobre a instalação do OpenLAB CDS, consulte os guias de instalação do CDS.

Instalar a Análise de Dados OpenLAB como um Complemento ou como um Aplicativo Individual

NOTA Antes da instalação, deve comprovar que a configuração de seu computador da estação de trabalho cumpre todos os requisitos. Em nossos sistemas em pacote, os computadores da estação de trabalho já estão configurados para um desempenho ideal com a Análise de dados OpenLAB. Se não estiver usando um computador Bundle, configure seu computador como descrito no guia de instalação correspondente incluído no disco 1.

Se não tiver instalado a Análise de dados OpenLAB juntamente com o OpenLAB CDS, é possível instalar a Análise de dados OpenLAB como um complemento do OpenLAB CDS ou como um aplicativo individual.

NOTA A Análise de dados OpenLAB não é compatível com instalações com ECM ou Data Store como armazenamento de dados central.

1 Execute do Instalador principal.

2 Na tela **Master Installer**, selecione **Installation**.

3 Selecione **OpenLAB Data Analysis**.

4 O **OpenLAB Data Analysis Installation Wizard** será exibido. Leia os termos do **License Agreement**. O Instalador principal fornece um arquivo em PDF do acordo de licença para impressão na opção **Resources** do menu principal.

5 Selecione **I agree with the terms and conditions**. Não será possível prosseguir com a instalação a menos que você concorde com esses termos.

6 Clique em **Next** para prosseguir para a tela **Installation Folder**.

7 Se já tiver instalado o OpenLAB CDS em seu PC, a Análise de dados OpenLAB será instalada como um complemento.

   a Para executar uma verificação de instalação como parte dessa instalação, selecione **Run Software Verification**. A ferramenta de verificação de software proporciona evidência documental de que o sistema foi elaborado e instalado corretamente. Caso prefira, pode executar a ferramenta de verificação de software posteriormente.

b Clique em **Next** para prosseguir para a tela **OpenLAB Shared Services Settings for Registration**.

c Digite o nome do servidor e o provedor de autenticação.

d Clique em **Test Connection ...** para executar uma verificação de conectividade.

O sistema exibirá uma mensagem de **Connection succeeded** se a verificação for bem-sucedida.

e Vá para a etapa 10.

8 Se não tiver instalado o OpenLAB CDS em seu PC, a Análise de Dados OpenLAB será instalada como um aplicativo individual.

a É possível usar a pasta padrão, digite o nome da pasta ou procure no diretório onde deseja instalar a Análise de Dados OpenLAB.

b Para executar uma verificação de instalação como parte dessa instalação, selecione **Run Software Verification**. A ferramenta de verificação de software proporciona evidência documental de que o sistema foi elaborado e instalado corretamente. Caso prefira, pode executar a ferramenta de verificação de software posteriormente.

c Clique em **Next**.

d Selecione o tipo de instalação desejado.

NOTA

A instalação em uma estação de trabalho em rede somente é suportada em combinação com a Edição EZChrom do OpenLAB CDS. Para este tipo de instalação, somente o Caminho corporativo sem Segurança Avançada de Arquivos (AFS) é suportado como armazenamento.

9 Se você selecionou **Networked Workstation**:

a Clique em **Next**.

b Na tela **OpenLAB Shared Services Settings for Registration** preencha o campo **Server name**.

c Selecione o provedor de autenticação como definido no Painel de controle do OpenLAB.

d Quando digitar o **Server name**, o botão **Test Connection...** será ativado. É possível testar a conectividade para este servidor antes de preencher o resto da tela.

e Selecione **Next**. O sistema executará uma verificação de conectividade com o servidor.

Caso o teste de conectividade falhe, verifique se o nome do servidor foi inserido corretamente, sem espaços, e selecione **Next** para executar novamente o teste. Caso o teste falhe novamente, você poderá:

- Digitar um novo servidor e tentar outro teste.
- Entrar em contato com o suporte interno para obter ajuda, caso não consiga se conectar a um servidor.

Quando um teste de conectividade for bem-sucedido, o sistema prosseguirá para a tela **Additional items**.

f Na tela **Additional Items**, **Enterprise path** é selecionado. O caminho corporativo foi configurado durante a instalação do servidor de Serviços compartilhados OpenLAB.

10 Clique em **Next** para prosseguir para a tela **Summary**.

11 Clique em **Start** para começar a instalação.

12 Quando a instalação estiver concluída, clique em **Next** para prosseguir para a tela **Installed Features**.

13 Clique em **Finish** para fechar o assistente de instalação.

3
Configuração do Painel de controle do OpenLAB

Sobre Projetos 16

Criar um Projeto para Análise de Dados OpenLAB como um Aplicativo Individual 17

Criar um Projeto para o ChemStation com a Análise de Dados OpenLAB 19

Criar um Projeto para o EZChrom com a Análise de Dados OpenLAB 21

Editar projetos EZChrom existentes 23

Criar Atalhos de Projetos 24

Este capítulo descreve a configuração de projeto que é necessária como uma preparação para trabalhar com OpenLAB Data Analysis.

Sobre Projetos

Um projeto é um indicador para um conjunto de diretórios que armazenam métodos, dados e modelos relacionados. É possível combinar vários projetos a um grupo de projetos e configurar os diretórios para o grupo todo. Os grupos de projetos podem ser usados para organizar projetos para corresponder à sua empresa.

É possível configurar projetos no Painel de Controle do OpenLAB.

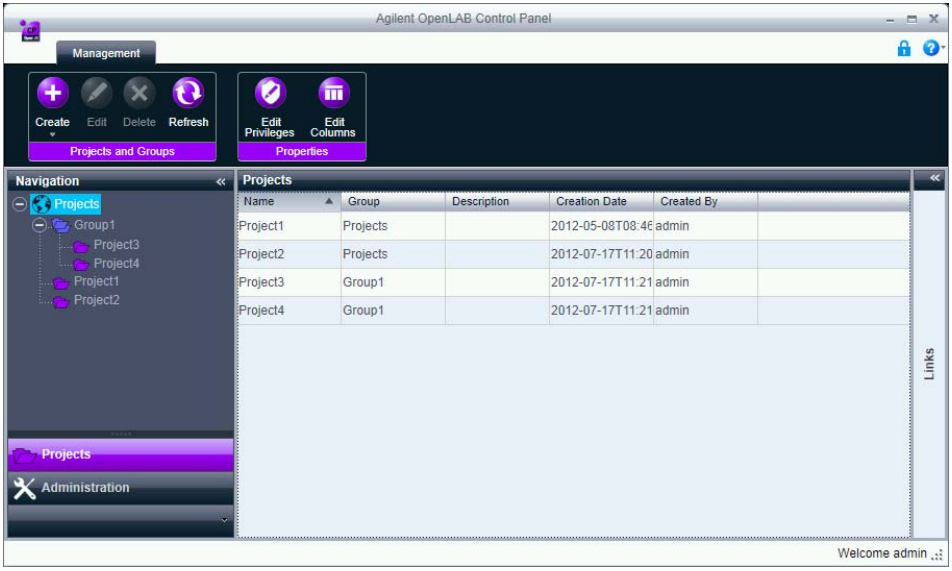


Figura 1 Painel de Controle OpenLAB

Existem diferentes tipos de projetos:

- Projetos EZChrom
- Projetos de relatórios
- Projetos da Análise de Dados OpenLAB (também necessários para usuários do ChemStation)

O tipo de projeto necessário depende do software instalado. Para cada tipo de projeto é possível fornecer atributos diferentes. Pode selecionar o tipo quando cria um novo projeto.

Criar um Projeto para Análise de Dados OpenLAB como um Aplicativo Individual

Este procedimento descreve como criar um projeto de Análise de Dados OpenLAB se não tiver as Edições ChemStation ou EZChrom do OpenLAB CDS instaladas em seu PC.

1 Inicie o Painel de Controle do OpenLAB.

2 Selecione a página **Projects**.

3 No painel de navegação, selecione o nó raiz **Projects** ou navegue até o grupo de projetos onde pretende criar seu projeto.

4 No grupo da faixa de opções **Projects and Groups**, clique em **Create > Create Project**.

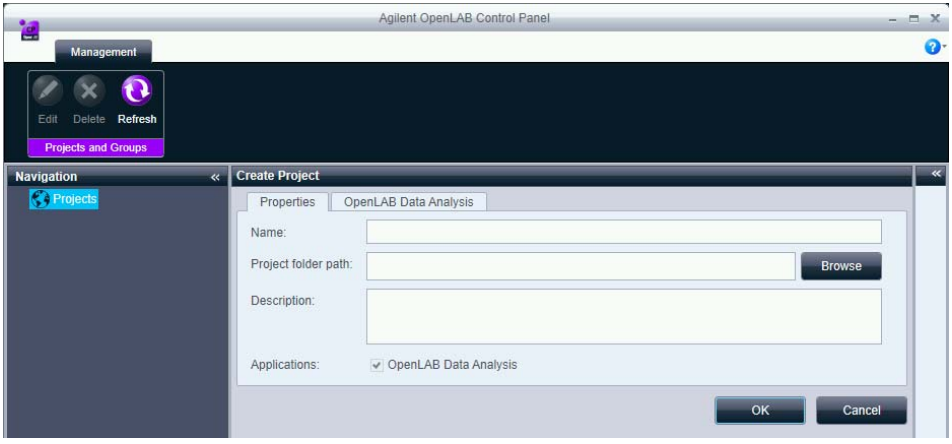


Figura 2 Criar um projeto no Painel de Controle do OpenLAB

5 Na caixa **Name**, digite um nome para o projeto.

6 Na caixa **Project folder path**, digite o caminho da pasta onde todos os dados de seu projeto estão localizados ou clique em **Browse** e navegue até a pasta e selecione-a. Esta pasta é normalmente uma pasta superior com subpastas de dados, métodos e modelos de relatório.

NOTA Após salvar o projeto, não é possível alterar o caminho da pasta do projeto novamente.

7 Na caixa **Description**, digite uma descrição do projeto.

8 Selecione a guia **OpenLAB Data Analysis** e forneça as informações necessárias para OpenLAB Data Analysis.

   a Insira um caminho válido em **Data path**. No OpenLAB Data Analysis será possível carregar somente dados que estejam localizados nesta pasta ou em suas subpastas.

   b Insira um caminho válido em **Method path**. Este caminho será usado como um caminho padrão para selecionar arquivos de método na OpenLAB Data Analysis, mas também é possível abrir métodos a partir de qualquer localização.

   c Insira um caminho válido em **Template path**. Este caminho será usado como um caminho padrão para selecionar modelos de relatório na OpenLAB Data Analysis, mas também é possível carregar modelos de relatório a partir de qualquer localização. É possível copiar os modelos de relatório predefinidos do disco 7 (\Disk7\Report Templates) para a localização do caminho do modelo.

9 Clique em **OK**.

Criar um Projeto para o ChemStation com a Análise de Dados OpenLAB

O próprio ChemStation não necessita configuração de projetos no Painel de Controle do OpenLAB. Porém, se desejar analisar os dados do ChemStation com a Análise de Dados OpenLAB, você deve configurar os projetos da Análise de Dados OpenLAB. Recomendamos que crie um projeto da Análise de Dados OpenLAB para cada instrumento do ChemStation e que configure os caminhos na guia **OpenLAB Data Analysis** para a subpasta de dados da pasta de seu instrumento (por exemplo, C:\Chem32\1) e que crie uma pasta de método para os métodos de processamento da Análise de Dados OpenLAB. Os modelos de relatório estão localizados em uma pasta independente de instrumentos.

O procedimento seguinte descreve como é possível criar automaticamente um projeto para cada instrumento configurado do ChemStation.

Prérequisitos

Antes de criar os projetos, já deve ter configurado todos os instrumentos do ChemStation. Para obter mais detalhes sobre a configuração do instrumento, consulte *Edição ChemStation do OpenLAB CDS da Agilent – Guia de Configuração de Instrumentos*.

1. Inicie o Painel de Controle do OpenLAB.
2. Selecione a página **Projects**.
3. No painel de navegação, selecione o nó raiz **Projects** ou navegue até o grupo de projetos onde pretende adicionar um projeto.
4. Clique com o botão direito no nó e selecione **Create Projects for ChemStation Instruments** no menu de contexto.

   No nó selecionado, o sistema criará um projeto de Análise de Dados OpenLAB para cada instrumento configurado do ChemStation.

   Os nomes dos projetos correspondem aos nomes dos instrumentos. Os caminhos de dados e métodos dos projetos correspondem aos caminhos usados para os instrumentos. O caminho do modelo não é específico de um instrumento; será o mesmo caminho para todos os projetos.

Por exemplo, se você instalou o Instrumento 1 no caminho **C:\Chem32\1**, seria criado um projeto com as propriedades seguintes:

- **Name**: Instrumento 1
- **Project folder path**: C:\Chem32\1
- **Data path**: C:\Chem32\1\DATA
- **Method path**: C:\Chem32\1\METHODS
- **Template path**: C:\Chem32\REPSTYLE

Como alternativa, é possível criar um projeto que inclui os caminhos de dados para todos os instrumentos. Isto permite carregar dados de todos os instrumentos. Por exemplo, o caminho de projeto para esse projeto poderia ser C:\Chem32 e o caminho de dados também poderia ser C:\Chem32.

Criar um Projeto para o EZChrom com a Análise de Dados OpenLAB

Se usar o EZChrom, você deve configurar os projetos do EZChrom no Painel de Controle do OpenLAB. Para obter mais detalhes, consulte a ajuda on-line do Painel de Controle do OpenLAB. O procedimento seguinte descreve como criar um projeto do EZChrom com informações adicionais para a OpenLAB Data Analysis.

1 Inicie o Painel de Controle do OpenLAB.

2 Selecione a página **Projects**.

3 No painel de navegação, selecione o nó raiz **Projects** ou navegue até o grupo de projetos onde pretende criar seu projeto.

4 No grupo da faixa de opções **Projects and Groups**, clique em **Create > Create Project**.

5 Na caixa **Name**, digite um nome para o projeto.

6 Na caixa **Project folder path**, digite o caminho da pasta de seu projeto ou clique em **Browse** e navegue até a pasta e selecione-a. Esta pasta contém subpastas, por exemplo, para métodos, resultados e sequências (por exemplo C:\Enterprise\Projects\Project1). Para uma estação de trabalho em rede, o Caminho corporativo é o Caminho da pasta do projeto.

NOTA Após salvar o projeto, não é possível alterar o caminho da pasta do projeto novamente.

7 Na caixa **Description**, digite uma descrição do projeto.

8 Selecione ambas as caixas de seleção, **EZChrom** e **OpenLAB Data Analysis**.

9 Selecione a guia **EZChrom** e forneça as informações necessárias para o EZChrom. Para obter mais detalhes, consulte a ajuda on-line.

10 Selecione a guia **OpenLAB Data Analysis** e forneça as informações necessárias para a OpenLAB Data Analysis.

a Insira um caminho válido em **Data path**. Na OpenLAB Data Analysis será possível carregar somente dados que estejam localizados nesta pasta ou em suas subpastas.

NOTA Use o mesmo caminho de **Results** na guia **EZChrom** (por exemplo C:\Enterprise\Projects\Project1\Results).

b Insira um caminho válido em **Method path**. Este caminho será usado como um caminho padrão para selecionar arquivos de método na OpenLAB Data Analysis, mas também é possível abrir métodos a partir de qualquer localização.

c Insira um caminho válido em **Template path**. Este caminho será usado como um caminho padrão para selecionar modelos de relatório na OpenLAB Data Analysis, mas também é possível carregar modelos de relatório a partir de qualquer localização. É possível copiar os modelos de relatório predefinidos do disco 7 (\Disk7\Report Templates) para a localização do caminho do modelo.

11 Clique em **OK**.

Editar projetos EZChrom existentes

Se você instalou a OpenLAB Data Analysis como um complemento à Edição EZChrom, poderá ter projetos já criados para o EZChrom no Painel de controle do OpenLAB. O procedimento seguinte descreve como se deve configurar estes projetos para usá-los com o OpenLAB Data Analysis.

1 Inicie o Painel de Controle do OpenLAB.

2 Selecione a página **Projects**.

3 No painel de navegação, navegue até seu projeto EZChrom existente.

4 Clique em **Edit** na faixa de opções.

5 Selecione a caixa de seleção **OpenLAB Data Analysis**.

6 Selecione a guia **OpenLAB Data Analysis** e forneça as informações necessárias para a OpenLAB Data Analysis.

   a Insira um caminho válido em **Data path**. Na OpenLAB Data Analysis será possível carregar somente dados que estejam localizados nesta pasta ou em suas subpastas.

NOTA Use o mesmo caminho de **Results** na guia **EZChrom** (por exemplo C:\Enterprise\Projects\Project1\Results).

   b Insira um caminho válido em **Method path**. Este caminho será usado como um caminho padrão para selecionar arquivos de método na OpenLAB Data Analysis, mas também é possível abrir métodos a partir de qualquer localização.

   c Insira um caminho válido em **Template path**. Este caminho será usado como um caminho padrão para selecionar modelos de relatório na OpenLAB Data Analysis, mas também é possível carregar modelos de relatório a partir de qualquer localização. É possível copiar os modelos de relatório predefinidos do disco 7 (\Disk7\Report Templates) para a localização do caminho do modelo.

Criar Atalhos de Projetos

É possível criar um atalho na área de trabalho para cada projeto de Análise de Dados OpenLAB no Painel de Controle do OpenLAB. Com este atalho, é possível iniciar a Análise de Dados OpenLAB diretamente sem iniciar primeiro o Painel de Controle do OpenLAB. Os caminhos para o projeto correspondente são aplicados automaticamente.

1 No Painel de Controle do OpenLAB, selecione a página **Projects**.

2 Navegue até o projeto para o qual pretende criar um atalho na área de trabalho.

3 Clique em **Create Desktop Shortcut** .

É criado um atalho em sua área de trabalho com o nome do projeto no Painel de Controle do OpenLAB.

4
Trabalhar com a Análise de Dados OpenLAB

Opcional: Preparação de Dados de Exemplo 26
Iniciar o Aplicativo 27
Introdução à Interface do Usuário 28
- Termos Usados para Descrever os Elementos da Interface de Usuário 28
- Selecionar uma Injeção 31
- Trabalhando com Layouts 32
- Personalizar seu Espaço de Trabalho 33

Fluxo de Trabalho Geral 35
- Carregar Dados 36
- Revisar Cromatogramas 37
- Revisar grandes quantidades de dados 40
- Trabalhar com Métodos 43
- Reprocessando Dados 46

Usar Recursos Específicos 49
- Ajustar a Vista na Janela de Cromatogramas 49
- Editar um Método com uma Calibração de Nível 2 54
- Integração Manual 66

Gerar um Relatório 82
- Para Gerar Relatórios Automaticamente 82
- Para Gerar um Relatório Manualmente 84

Este capítulo descreve as funções gerais e específicas da OpenLAB Data Analysis. Introduz a interface do usuário e inclui informações sobre dados básicos e tratamento de métodos. Os recursos específicos incluem descrições de opções de exibição avançadas, configurações de calibração e integração.

Opcional: Preparação de Dados de Exemplo

Para interpretar o manual e reproduzir os exemplos descritos nos capítulos seguintes, a Análise de Dados OpenLAB é entregue com conjuntos de resultados como dados de exemplo.

1 Navegue até Demo_Data\Getting_Started_Guide no disco 7.

2 Copie os arquivos de dados de exemplo para sua pasta de dados local que forneceu nas configurações do projeto no Painel de Controle do OpenLAB no **Data path**.

   Por exemplo, com o ChemStation o caminho de dados pode ser C:\Chem32\1\Data.

Iniciar o Aplicativo

Se criou um atalho para seu projeto, é possível clicar duas vezes no atalho para abrir o projeto diretamente. Como alternativa, é possível abrir qualquer projeto do Painel de Controle do OpenLAB conforme descrito abaixo.

1 Inicie o Painel de Controle do OpenLAB.

2 A partir do painel de navegação, selecione a página **Projects**.

3 Navegue até seu projeto de Análise de Dados OpenLAB.

4 Clique em **Start Data Analysis**.

Introdução à Interface do Usuário

Termos Usados para Descrever os Elementos da Interface de Usuário

Termos da tela relacionados com a faixa de opções

A *faixa de opções* é um elemento da barra de ferramentas que é sempre mostrado no topo da janela do aplicativo. É uma combinação de um menu clássico com uma barra de ferramentas de aplicativos. A faixa de opções contém dois tipos diferentes de *guias da faixa de opções*. O primeiro tipo está sempre visível (por exemplo, **Home**) e permite o acesso às funções que são apresentadas independentemente do objeto selecionado no aplicativo. O outro tipo (*guia contextual*) aparece somente se selecionar um elemento de interface de usuário específico.

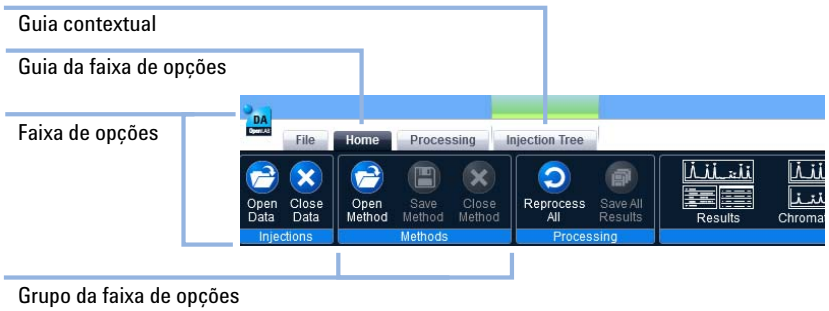


Figura 3 A faixa de opções

Termos da tela relacionados com o painel de navegação

O *painel de navegação* é a área à esquerda do aplicativo. Consiste em uma barra de título, uma *árvore de navegação* que poderá conter seções adicionais e os botões de seleção de *visualização*. As seleções adicionais são, por exemplo, o *seletor de sinal* e o *seletor de método*. O layout e o propósito da árvore de navegação dependem da visualização selecionada. Em **Data Processing**, a árvore de navegação é denominada *árvore de injeção* e contém todos os dados carregados.

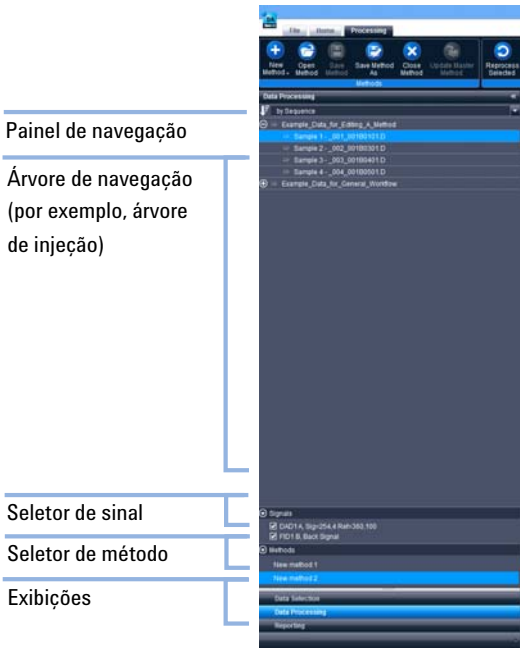


Figura 4 O painel de navegação

Termos da tela relacionados com o espaço de trabalho

O *espaço de trabalho* é o espaço na interface de usuário onde são mostradas as diferentes *janelas*. Uma janela pode ter uma *barra de ferramentas* específica.

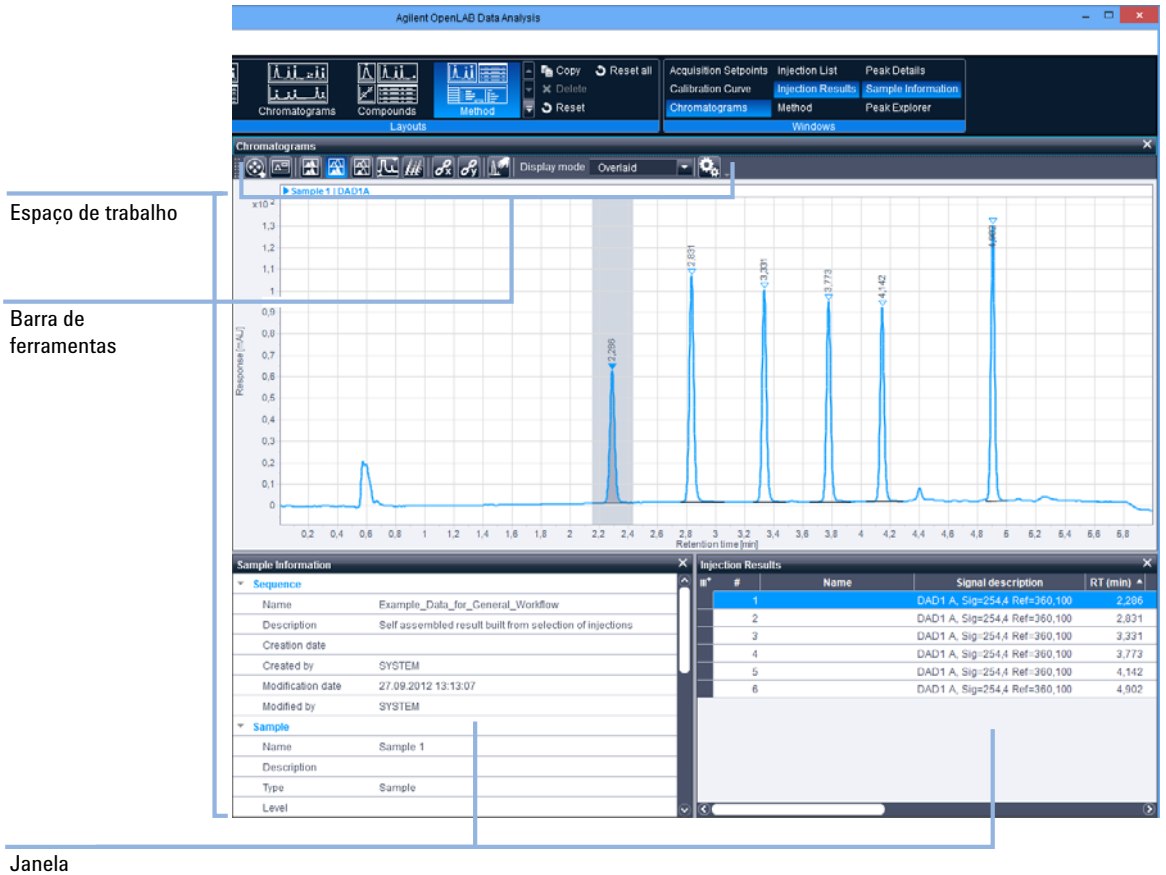


Figura 5 O espaço de trabalho

Selecionar uma Injeção

Existem formas diferentes de selecionar uma injeção da árvore de injeção:

- Realce azul: Se selecionou uma ou mais injeções, todas as injeções realçadas em azul podem ser reprocessadas (consulte "Para associar e reprocessar os dados" na página 46).

  A última injeção selecionada possui um realce azul claro e é denominada de *injeção de foco*. Os dados relacionados com a injeção de foco são mostrados nas janelas correspondentes.

  As injeções realçadas em azul são referidas como *injeções selecionadas*.

- Com marco: Independentemente do realce azul, é possível marcar as injeções na árvore de injeção. As injeções com um marco vertical são referidas como *injeções marcadas*. Injeções com um marco horizontal são *não marcadas*. A janela **Chromatograms** exibe todas as injeções marcadas mais a injeção de foco (consulte "Revisar Cromatogramas" na página 37). As injeções marcadas serão exibidas continuamente, mesmo se alterar a injeção de foco.

A figura seguinte mostra os tipos diferentes de seleção de injeção.

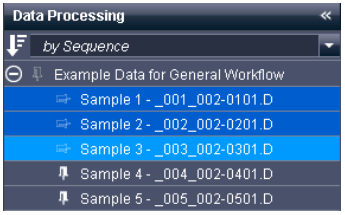


Figura 6 Selecionar uma injeção

Trabalhando com Layouts

O aplicativo fornece vários layouts pré-configurados para tarefas de usuário diferentes. Os layouts definem que janelas são mostradas em seu espaço de trabalho e como são posicionadas. É possível ajustar estes layouts ou colocá-los no padrão de fábrica.

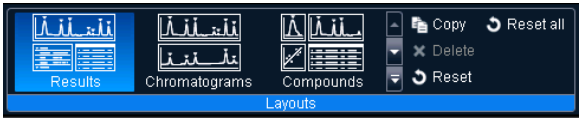


Figura 7 Grupo da faixa de opções **Layouts**

Para Ajustar um Layout

1 Na faixa de opções, selecione o layout que pretende ajustar.

2 Personalize seu espaço de trabalho para adequar às suas necessidades.

O layout é automaticamente salvo após cada modificação no espaço de trabalho.

Se se conectar à Análise de Dados OpenLAB com um nome do usuário e senha, o layout alterado é salvo especificamente para seu usuário.

Para criar um layout personalizado

1 No grupo da faixa de opções **Layouts**, selecione e ajuste um dos layouts predefinidos, por exemplo, **Results**.

2 Para salvar um layout para uso posterior, clique em **Copy**.

Seu layout personalizado está agora listado na faixa de opções, por exemplo, **Results1**.

Para Reinicializar um Layout

1 Para reinicializar um layout específico, selecione o layout na faixa de opções e clique em **Reset**.

2 Para reinicializar todos os layouts, clique em **Reset all**.

Personalizar seu Espaço de Trabalho

Na OpenLAB Data Analysis, é possível alterar a visibilidade, a posição e o tamanho de todas as janelas. Se alterar um layout, o aplicativo recordará o novo layout. Quando iniciar o aplicativo no próximo acesso, suas alterações ainda estarão ativas.

Para Mostrar ou Ocultar uma Janela

1. Para ocultar uma janela, clique simplesmente na cruz no canto superior direito da janela. Como alternativa, é possível clicar no botão correspondente a esta janela no grupo da faixa de opções **Windows**.
2. Para mostrar uma janela, clique no botão correspondente a esta janela no grupo da faixa de opções **Windows**.
3. Para exibir uma janela com guias, encontre a janela onde é mostrada a guia necessária e selecione essa guia.

Para Redimensionar uma Janela

1. Coloque o mouse entre duas janelas.
2. Quando o ponteiro se tornar uma seta de duas pontas, arraste-o para mover a linha divisória.

Para Modificar a Posição de uma Janela

1. Agarre no título da janela e mova-o para uma nova posição.

NOTA Se deseja mover uma janela com guias, agarrar no título da janela moverá toda a janela incluindo todas as guias. Para mover guias individuais para fora de uma janela, deve agarrar no rótulo da guia.

Assim que mover a janela, as novas e possíveis posições são indicadas por setas. Quando move a janela sobre um ícone de seta, a localização nova correspondente para a janela é realçada em azul.

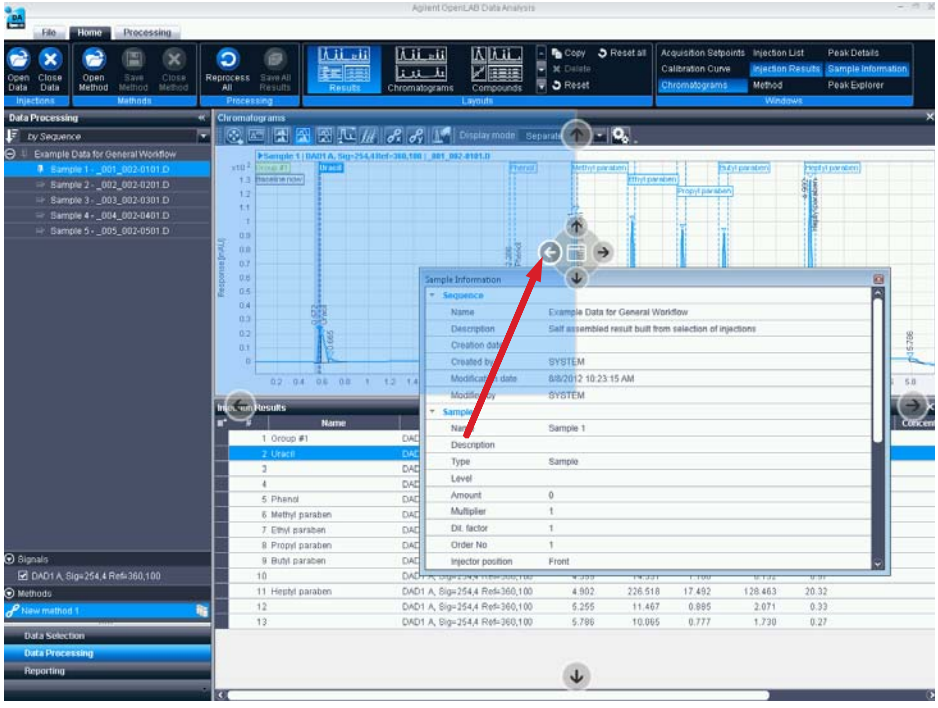
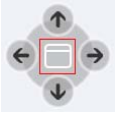


Figura 8 Posicionar uma janela

2 Se deseja posicionar uma janela como uma nova guia de uma janela existente, mova-a sobre a janela existente e, em seguida, sobre o meio do ícone de setas central.



Fluxo de Trabalho Geral

Esta seção oferece uma visão geral das tarefas básicas na Análise de Dados OpenLAB.

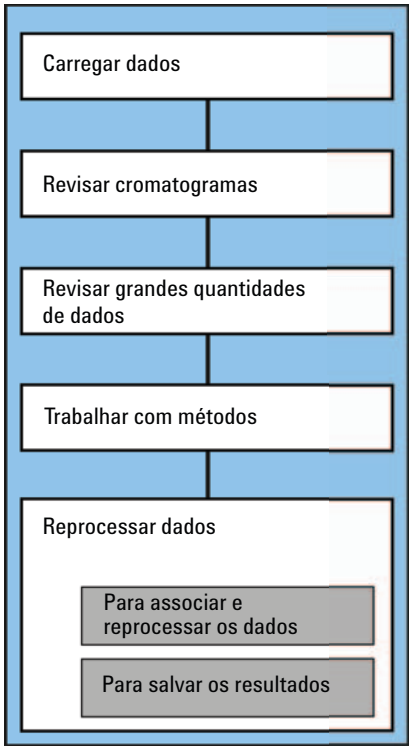


Figura 9 Tarefas básicas

A seção *Carregar Dados* explica como carregar um conjunto de resultados ou uma amostra única. Em *Revisar cromatogramas*, você aprenderá como revisar cromatogramas de injeções selecionadas e como receber detalhes sobre picos específicos. A seção *Revisar grandes quantidades de dados* mostra como revisar e comparar facilmente grandes quantidades de dados usando o Peak Explorer. *Trabalhar com Métodos* inclui uma explicação do que é um método e como criar e salvar um método. A seção *Reprocessar dados* explica como associar e reprocessar seus dados. Após reprocessar os dados, é possível salvar seus resultados.

Carregar Dados

Na visualização **Data Selection**, é possível selecionar os conjuntos de resultados ou amostras únicas e carregar os dados associados. Se já tiver dados carregados, os seguintes procedimentos adicionarão os conjuntos de resultados ou amostras únicas aos dados que já estão disponíveis na visualização **Data Processing**.

1 Selecione a visualização **Data Selection**.

A árvore de seleção de dados mostra a estrutura de pasta do caminho de dados dada no projeto de Análise de Dados OpenLAB no Painel de Controle do OpenLAB. A árvore pode conter os seguintes itens:

- (pastas): Uma pasta pode conter outras pastas, conjuntos de resultados ou corridas únicas. Se contiver conjuntos de resultados, estes são exibidos como subdiretórios na árvore. Se a pasta contém corridas únicas, os arquivos de dados respectivos são listados na janela **Injection List**.
- (conjuntos de resultados): Os arquivos de dados contidos são listados na janela **Injection List**. Só é possível carregar todo o conjunto de resultados; de carregamento partes de um conjunto de resultados é suportado.

2 Para carregar um conjunto de resultados:

a Navegue até o conjunto de resultados pretendido e selecione-o.

b Na faixa de opções, clique em **Load Data**.

OU

Clique duas vezes em um conjunto de resultados na árvore de navegação.

3 Para carregar uma amostra única:

a Navegue até a pasta que contém os arquivos de dados correspondentes e selecione as injeções necessárias na janela **Injection List**.

b Na faixa de opções, clique em **Load Data**.

Os conjuntos de resultados ou injeções selecionadas são carregados e o aplicativo altera para a visualização **Data Processing**. Os dado é adicionado a outros dados que você pode já ter carregado anteriormente. Se existem métodos de processamento associados aos dados, os métodos são carregados automaticamente em conjunto com os dados. Os métodos são então listados no seletor de método.

Injeções com a extensão *.D* são amostras geradas pelo ChemStation e injeções com a extensão *.dat* são geradas pelo EZChrom.

NOTA Para reproduzir os exemplos descritos nas seções seguintes, carregue o conjunto de resultados **Example_Data_for_General_Workflow**. Este conjunto de resultados é entregue como dados de exemplo com a Análise de Dados OpenLAB.

Revisar Cromatogramas

As seções seguintes descrevem como trabalhar com cromatogramas e receber detalhes sobre picos específicos.

Para Revisar o Cromatograma de uma Injeção Única

1. Carregue o conjunto de resultados ou a amostra única relevantes. Os exemplos seguintes usam o conjunto de resultados **Example_Data_for_General_Workflow**.
2. Na árvore de injeção, realce ou marque a injeção da qual deseja revisar o cromatograma.
3. Se a janela **Chromatograms** não for mostrada, escolha **Chromatograms** do grupo da faixa de opções **Layouts**.

   Sua janela da Análise de Dados OpenLAB deve ser parecida com a figura seguinte.

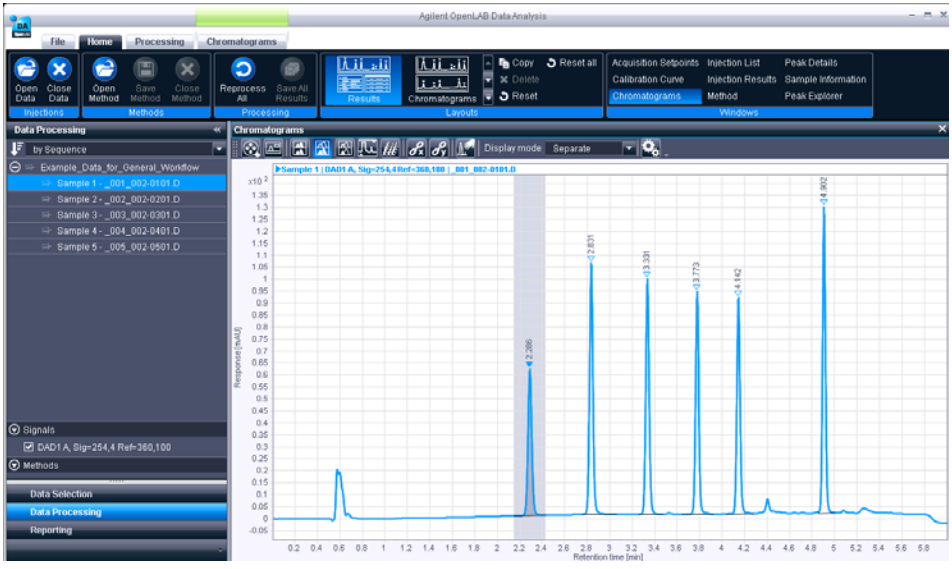


Figura 10 Layout dos **Chromatograms**

As partes superiores do pico são rotuladas com os tempos de retenção.

No caso de uma injeção multisinal, podem ser exibidos vários sinais. A janela **Chromatograms** mostra todos os sinais que selecionou na área **Signal selection** no painel de navegação.

A cor dos sinais é determinada automaticamente pelo aplicativo.

4 Se desejar exibir somente um sinal, desmarque as caixas de seleção dos outros sinais na área **Signal selection** do painel de navegação.

A janela **Chromatograms** mostra agora o cromatograma que você escolheu. (Para ajustar a visualização na janela **Chromatograms**, por exemplo fazendo zoom ou usando escalonamento personalizado, consulte "Ajustar a Vista na Janela de Cromatogramas" na página 49)

Para Revisar os Resultados de um Pico Específico

1 Exiba o cromatograma que contém um pico específico na janela **Chromatograms**.

2 Selecione o layout **Results** do grupo da faixa de opções **Layouts**.

Seu espaço de trabalho consiste agora em três janelas – **Chromatograms**, **Sample Information** e **Injection Results** – conforme a figura seguinte:

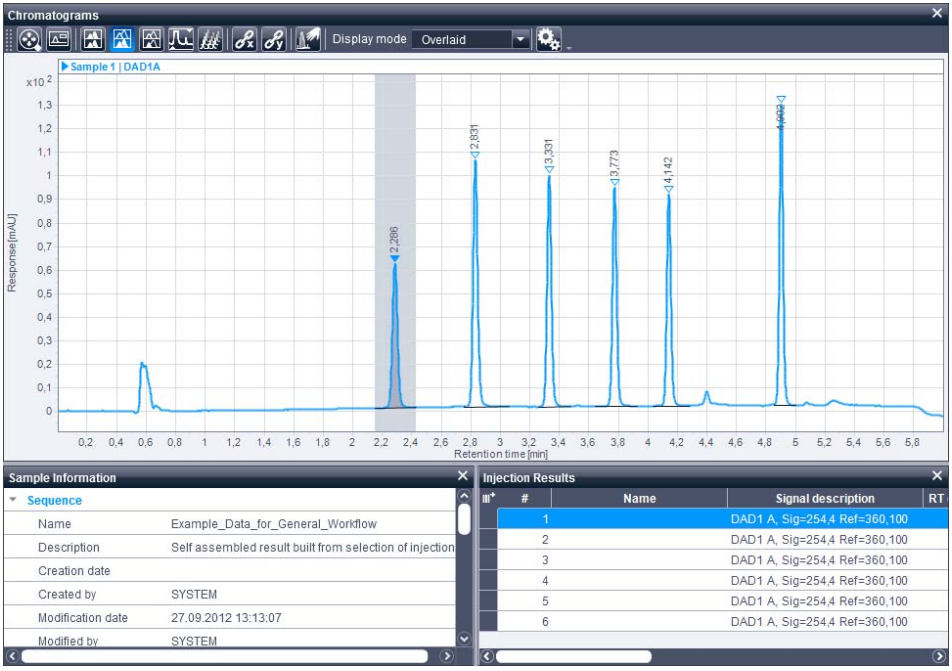


Figura 11 Layout dos **Results**

3 Clique em um pico específico na janela **Chromatograms** para ver mais detalhes nesse pico na janela **Injection Results**.

A linha correspondente ao pico é realçada na janela **Injection Results**. Na janela **Injection Results**, é possível alternar entre picos clicando nas linhas diferentes.

O realce do pico é sempre sincronizado entre todas as janelas.

Se tiver executado uma Análise de Dados no ChemStation ou EZChrom, a janela **Injection Results** contém estes resultados, por exemplo **Area** ou **Height**.

Revisar grandes quantidades de dados

Esta seção descreve como revisar e comparar facilmente grandes quantidades de dados usando o Peak Explorer.

NOTA Para reproduzir os exemplos descritos nas seções seguintes, carregue o conjunto de resultados **Example_Data_for_Peak_Explorer**. Este conjunto de resultados é entregue como dados de exemplo com a Análise de dados OpenLAB.

Para mostrar o Peak Explorer

1 Para mostrar o Peak Explorer, clique em **Peak Explorer** no grupo da faixa de opções **Windows**.

2 Para este exemplo, abra também a janela **Chromatograms**, feche todas as outras janelas e desative o sinal **DAD1 B**.

Para escolher as injeções mostradas no Peak Explorer

O Peak Explorer mostra os picos de todas as injeções marcadas, ou seja, todas as injeções com um marco vertical na Árvore de injeção. Se tiver carregado várias amostras ou conjuntos de resultados, é possível comparar os dados para todos eles.

Uma linha azul realça todas as bolhas pertencentes à injeção de foco. Um círculo azul realça o pico selecionado desta injeção. Estas seleções estão sincronizadas com as injeções ou os picos selecionados em outras janelas.

Se não existir qualquer injeção marcada, o aplicativo mostra todas as injeções de todos os conjuntos de resultados carregados e de amostra única.

Sobre o Peak Explorer

O diagrama do Peak Explorer mostra as injeções marcadas de todas as sequências carregadas em um gráfico tipo bolha, com um diagrama para cada sinal selecionado:

- O eixo y mostra as injeções carregadas, ordenadas como na árvore de injeção.
- O eixo x mostra os tempos de retenção de todas as injeções.
- O tamanho da bolha representa uma valor relacionado com o tamanho do pico. É possível escolher o valor a partir da lista suspensa na barra de ferramentas do Peak Explorer. Ao usar, por exemplo, a largura do pico como um indicador para o tamanho da bolha, poderá localizar graficamente picos com uma má integração. Com os botões da barra de ferramentas, poderá também escolher se pretende ver picos identificados, não identificados ou ambos no diagrama.

As bolhas são exibidas em cores diferentes:

Picos identificados

Picos não identificados

O aplicativo permite detectar rapidamente um pico inesperado.

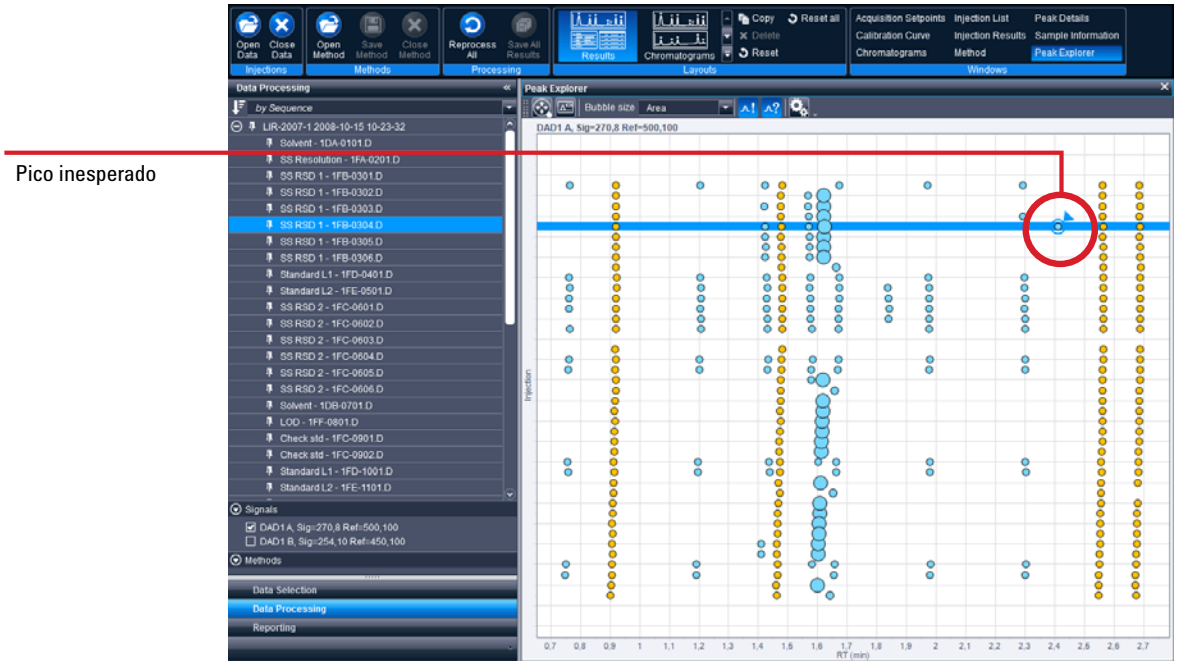


Figura 12 Peak Explorer: detectar um pico inesperado

Na janela **Chromatograms** pode detectar se o composto não tem um tempo de retenção constante, mas não pode ver se a variação nos tempos de retenção é uma alteração sistemática ou uma distribuição aleatória. Ao fazer zoom no Peak Explorer, torna-se visível uma alteração sistemática.

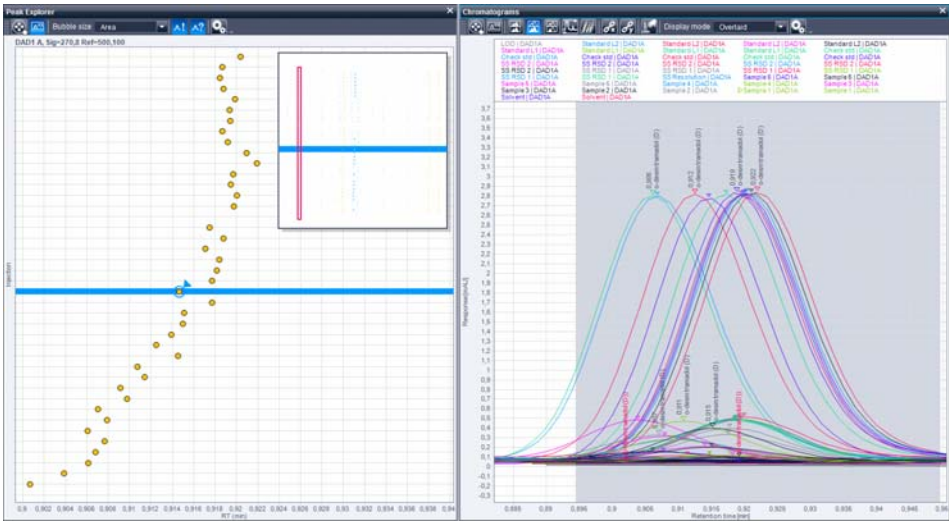


Figura 13 Peak Explorer: detectar uma alteração sistemática

Trabalhar com Métodos

Um método contém todas as informações e todos os parâmetros de que você necessita para processar os dados e gerar resultados.

Por exemplo, na seção **Compounds**, é possível encontrar configurações para a identificação e calibração do composto. O nó **Identification** inclui o nome, sinal e tempo de retenção esperado do pico, por exemplo. O nó **Calibration** é necessário para criar uma curva de calibração por meio da configuração de parâmetros como unidade de quantidade e número de níveis (para obter mais detalhes, consulte "Para Editar os Parâmetros de Identificação do Composto" na página 59 e "Para Editar os Parâmetros de Calibração" na página 61).

Em **Reports** você pode especificar o **Report template** e o **Report destination** (para obter mais detalhes sobre como gerar um relatório, consulte "Gerar um Relatório" na página 82).

É possível trabalhar com métodos vazios ou incompletos, mas um método deve ser salvo pelo menos uma vez antes de o associar a determinados dados. Ao associar dados a um método, os dados são reprocessados automaticamente.

Para Criar um Novo Método

1 Na faixa de opções, selecione a guia **Processing**.

2 Clique em **New Method**.

O aplicativo altera para o layout **Method**. Os campos de entrada para as propriedades do novo método são mostrados na janela **Method**.

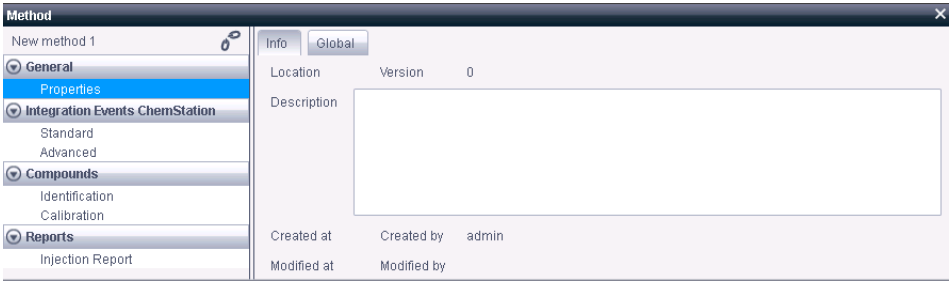


Figura 14 Janela do **Method**

O novo método é adicionado automaticamente ao seletor de método na árvore de navegação.

Adjacente ao nome do método, um símbolo de associação mostra se este método está associado a uma injeção:

: Este método está associado à injeção de foco.

: Este método *não* está associado à injeção de foco.

3 Na guia **Info**, insira uma descrição para o novo método.

O nome do método é determinado pelo nome do arquivo ao salvar o método.

4 Na guia **Global** é possível selecionar o integrador. Para este exemplo, selecione o **ChemStation integrator**.

As propriedades na seção **Integration Events** são parâmetros padrão.

Para obter mais detalhes sobre **Integration Events** e **Compounds**, consulte "Editar um Método com uma Calibração de Nível 2" na página 54.

Para Salvar um Método

Se criou um método novo ou alterou um método existente e não salvou as alterações, o método é marcado com o símbolo de lápis .

1 Selecione a guia da faixa de opções **Processing**.

2 Clique em **Save Method As** no grupo da faixa de opções **Methods**.

A caixa de diálogo **Save As** abrirá.

3 Navegue até o caminho onde deseja armazenar o método. Como alternativa, é possível clicar no campo com o nome do caminho e editar o nome do caminho diretamente.

A lista suspensa mostra os caminhos usados recentemente. Por padrão, o aplicativo mostra o caminho do método que especificou nas configurações do projeto no Painel de Controle do OpenLAB.

4 Insira um nome de arquivo.

5 Clique em **Save**.

Para salvar as alterações em um método existente:

1 Selecione a guia da faixa de opções **Processing**.

2 Clique em **Save Method** no grupo da faixa de opções **Methods**.

Reprocessando Dados

Para associar e reprocessar os dados

Ao associar dados a um método, estes dados são reprocessados automaticamente. Reprocessar significa que você aplica todos os parâmetros de métodos a seus dados.

1 Clique na injeção para a selecionar. É possível selecionar várias injeções mantendo a tecla **Ctrl** pressionada ou um intervalo de injeções mantendo pressionada a tecla **Shift** enquanto clica.

   Os arquivos de dados selecionados são realçados em azul na árvore de injeção.

2 No seletor de método, clique com o botão direito do mouse no método que você pretende associar aos arquivos de dados selecionados e selecione **Link selected injections to selected method** no menu de contexto.

   OU

   Selecione o método relevante no seletor de método. Clique com o botão direito do mouse nos arquivos de dados selecionados e selecione **Link selected injections to selected method** no menu de contexto.

   Os dados estão associados ao método e são reprocessados.

   O símbolo de associação é mostrado em frente de todos os arquivos de dados selecionados. Se selecionar uma injeção, o método correspondente mostrará o símbolo de associação.

   Caso os dados sejam reprocessados com êxito, sua árvore de injeção deverá ser semelhante à figura seguinte:

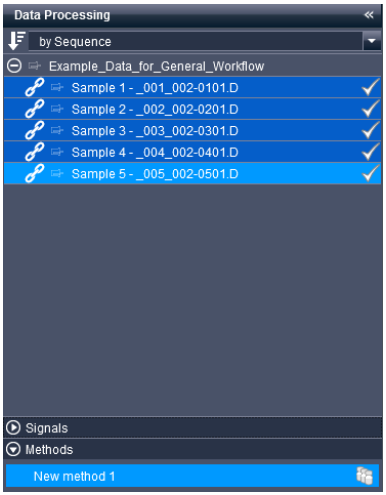


Figura 15 Painel de navegação

Se os arquivos de dados reprocessados pertencem a um conjunto de resultados, o aplicativo copia o método de processamento para o diretório do conjunto de resultados. O método copiado é adicionado à lista de métodos no seletor de método e marcado com um símbolo do conjunto de resultados .

3 Se efetuar alterações em seu método e pretender ver tais mudanças em seus dados, pode reprocessar seus dados manualmente:

   a Na faixa de opções, selecione a guia **Processing**.

   b Na faixa de opções, clique em **Reprocess Selected**.

   OU

   Clique com o botão direito nos arquivos de dados e selecione **Reprocess selected injections** no menu de contexto.

Cada um dos arquivos de dados selecionados (realçados em azul) é reprocessado usando o método associado a cada um deles. Os arquivos de dados diferentes podem ter métodos diferentes atribuídos.

Os novos resultados são calculados automaticamente e podem ser revisados diretamente na Análise de Dados OpenLAB. Para os conjuntos de resultados, o método de processamento é copiado automaticamente para a pasta do conjunto de resultados.

Os símbolos seguintes podem ser mostrados para os arquivos de dados reprocessados:

- O arquivo de dados foi reprocessado com sucesso, mas não foi salvo.
- Avisos ocorridos durante o reprocessamento. Mova o mouse sobre o símbolo para obter mais detalhes.
- O arquivo de dados não pode ser reprocessado. Não existe um método associado ao arquivo de dados ou foi usado um método incorreto. Mova o mouse sobre o símbolo para obter mais detalhes.
- O reprocessamento foi interrompido ou ocorreu um erro.
- * A integração manual ou a identificação manual foram aplicadas aos dados.

Para Salvar os Resultados

1 Se os resultados estiverem corretos, é possível salvar os resultados clicando em **Save All Results**.

Após salvar, as marcas de verificação junto das amostras desaparecem na árvore de injeção.

Os métodos que estiverem associados às injeções de um conjunto de resultados serão salvos conjuntamente com os resultados. Outros métodos (não associados ou associados a amostras únicas) devem ser salvos individualmente.

2 Opcional: Se você pretender descartar as modificações, escolha simplesmente os dados e o método sem os salvar. Na guia da faixa de opções **Home**, clique em **Close Data**.

Os métodos associados serão fechados automaticamente.

Se um método não estiver associado aos dados, é possível fechar o método selecionando a guia da faixa de opções **Processing** e clicando em **Close Method**.

Usar Recursos Específicos

Ajustar a Vista na Janela de Cromatogramas

Esta seção descreve como alterar a visualização de um cromatograma fazendo zoom, alterarando a área de janela visível e escolhendo entre modos de exibição diferentes. Também contém uma maneira de mostrar e ocultar a janela de visualização do zoom e usar o ajuste de escala personalizado.

NOTA Para reproduzir os exemplos descritos nas seções seguintes, carregue o conjunto de resultados **Example_Data_for_General_Workflow**. Este conjunto de resultados é entregue como dados de exemplo com a Análise de dados OpenLAB.

Para Aumentar Zoom e Diminuir Zoom de um Gráfico

Se alterar o modo de exibição original de um cromatograma, suas configurações também serão aplicadas a mais cromatogramas.

1 Mova o mouse sobre a área de interesse dentro da janela **Chromatograms**.

2 Use a roda do mouse para aumentar ou diminuir zoom. Role para baixo para diminuir zoom e para cima para aumentar zoom.

O sistema aumentará ou diminuirá a área em volta da posição do cursor do mouse.

3 Como alternativa, é possível selecionar a área de interesse na qual deseja aumentar o zoom. Mantenha o mouse pressionado e faça um quadrado sobre a área de interesse.

A janela **Chromatograms** mostra agora a área selecionada.

4 Para diminuir zoom passo a passo, clique duas vezes no gráfico.

5 Para reinicializar suas ações de zoom, clique em na barra de ferramentas **Chromatograms**.

A janela **Chromatograms** mostra a escala original do cromatograma.

Para Mover ao Longo dos Eixos X e Y

Se alterar o modo de exibição original de um cromatograma, suas configurações também serão aplicadas a mais cromatogramas.

1 Para mover o eixo x ou y, mova o mouse sobre um dos eixos até que se transforme em uma seta de duas pontas.

2 Mantenha pressionado o botão esquerdo do mouse e mova o eixo para esquerda e para a direita ou para cima e para baixo.

NOTA Se usar o botão direito do mouse, você escalará o eixo x ou y.

3 Para reinicializar suas alterações, clique em na barra de ferramentas **Chromatograms**.

Para Mostrar e Ocultar a Janela de Visão Geral do Zoom

1 Para mostrar uma janela de visão geral do cromatograma inteiro, não ampliado e com ajuste de escala personalizado e a localização da área de zoom, clique em na barra de ferramentas **Chromatograms**.

A janela de visão geral aparece dentro da janela **Chromatograms**.

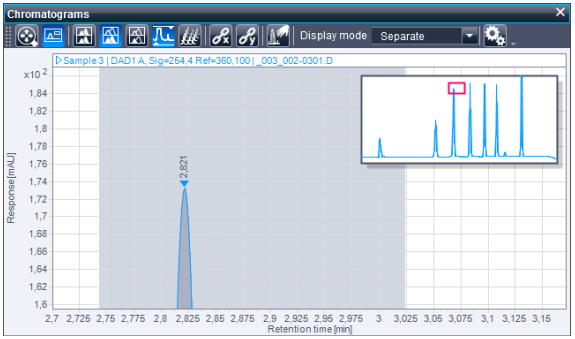


Figura 16 Janela de visão geral do zoom

2 Para ocultar a janela de visão geral, clique novamente em .

Para Ligar/Desligar o Escalonamento Personalizado

Se tiver dados com um grande pico solvente e deseja ignorar este pico em sua vista de **Chromatograms**, siga estes passos.

1 Carregue seus dados.

NOTA Para reproduzir o exemplo descrito nesta seção, carregue o conjunto de resultados **Example_Data_for_Editing_a_Method**. Este conjunto de resultados é entregue como dados de exemplo com a Análise de Dados OpenLAB.

2 Na janela **Chromatograms**, clique em na barra de ferramentas dos cromatogramas para ligar o ajuste de escala personalizado.

Figura 17 Ajuste de escala personalizado desligado

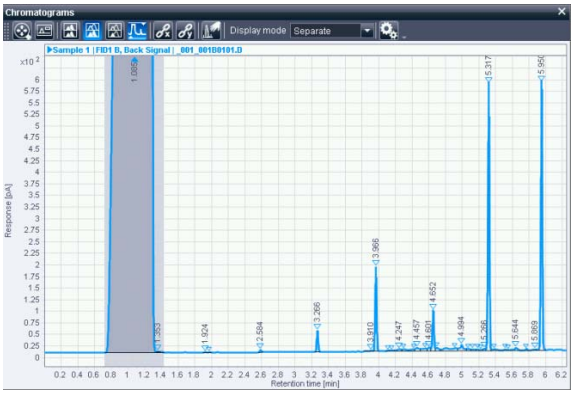


Figura 18 Ajuste de escala personalizado ligado

A escala do gráfico na janela **Chromatograms** altera automaticamente.

Se mais que um cromatograma for exibido, o ajuste de escala personalizado será aplicado a todos os cromatogramas.

3 Para alterar as configurações do ajuste de escala personalizado, clique em para abrir a janela **Chromatogram Properties**.

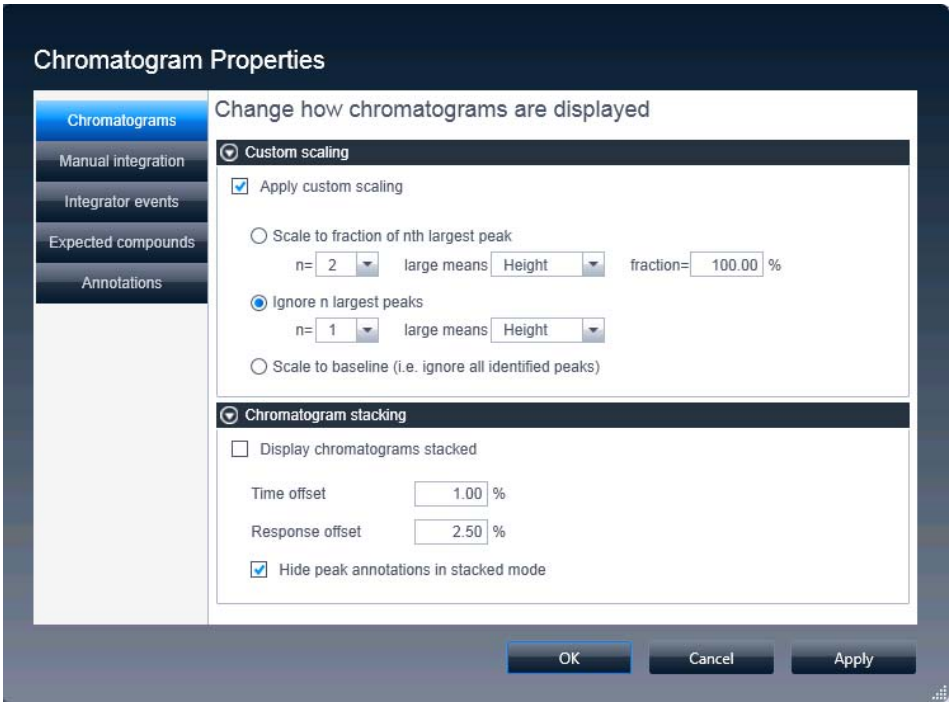


Figura 19 Configurações de ajuste de escala personalizado

É possível escolher entre

- **Scale to fraction of nth largest peak**
- **Ignore n largest peaks** e
- **Scale to baseline (i.e. ignore all identified peaks)**.

Por exemplo, quando você deixa a configuração padrão, o primeiro pico maior (aqui o pico solvente) será ignorado.

4 Clique em **OK** para aplicar e feche a janela **Chromatogram Properties**.

5 Para desligar o escalonamento personalizado, clique em novamente.

Editar um Método com uma Calibração de Nível 2

Esta seção fornece uma visão geral de como editar um método e como efetuar uma calibração de nível 2.

Geralmente, editar um método e efetuar uma calibração inclui os passos seguintes:

- Abra os dados relevantes.
- Crie um novo método e salve-o como arquivo.
- Associe as injeções ao método.
- Edite os eventos de integração para decidir que picos devem ser integrados.
- Edite os parâmetros do composto para identificação e calibração.
- Edite a lista de injeções para definir os parâmetros de amostra.
- Revise os resultados de calibração na tabela de resultados de injeção e na curva de calibração.
- Salve seus resultados e método para posterior reutilização.

Preparação de Dados e Métodos

1 Carregue o conjunto de resultados relevante.

NOTA

Para reproduzir os exemplos descritos nas seções seguintes, carregue o conjunto de resultados **Example_Data_for_Editing_a_Method**. Este conjunto de resultados é entregue como dados de exemplo com a Análise de dados OpenLAB.

2 Crie um novo método e salve-o como arquivo (consulte "Trabalhar com Métodos" na página 43).

3 Associe o método aos dados (consulte "Para associar e reprocessar os dados" na página 46).

Para Editar Eventos de Integração

Se seus dados mostram muitos picos pequenos e irrelevantes que gostaria de excluir de sua análise, é possível editar os **Integration Events** dentro de seu método.

1 Selecione o layout **Method** na guia da faixa de opções **Home**.

2 Na janela **Method**, selecione a seção **Integration Events** e o nó **Standard**.

3 Na tabela apresentada, é possível alterar parâmetros como **Slope sensitivity**, **Peak width** e **Area reject** alterando o **Value**.

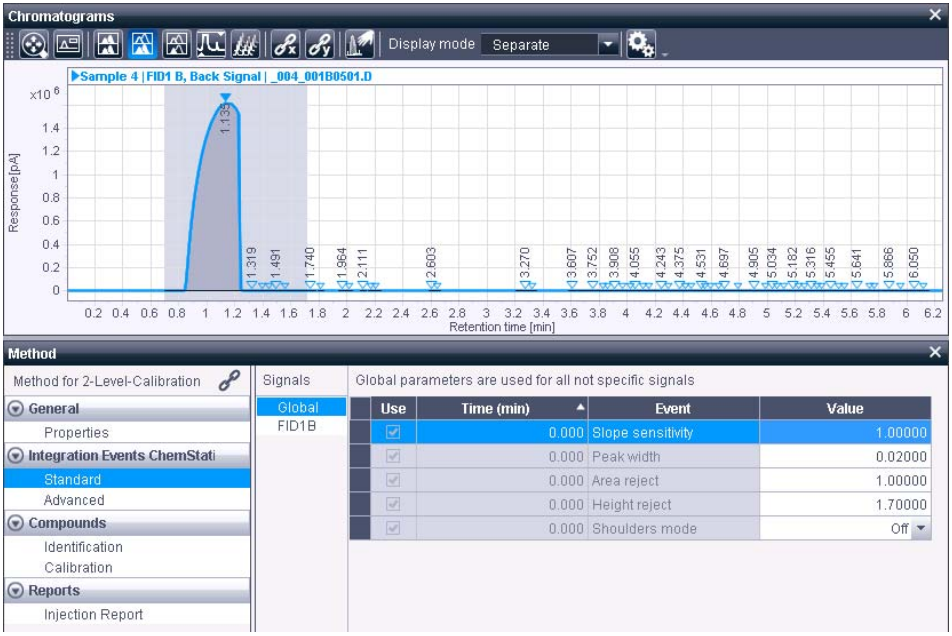


Figura 20 Amostra 1 antes de editar eventos de integração

4 O evento **Height reject**, por exemplo, define a altura do pico de interesse mais pequeno. Na Amostra 1 dos dados de exemplo, edite o evento **Height reject** alterando o **Value** de **1.7** para **45.0**.

5 Para aplicar a rejeição altura a todas as amostras, selecione todas as amostras e volte a processar os dados.

Ao usar os dados de exemplo, na janela **Chromatograms** só devem existir agora cinco outros picos além do pico solvente. Todos os outros picos mais pequenos estão agora sendo suprimidos, como mostra na figura seguinte.

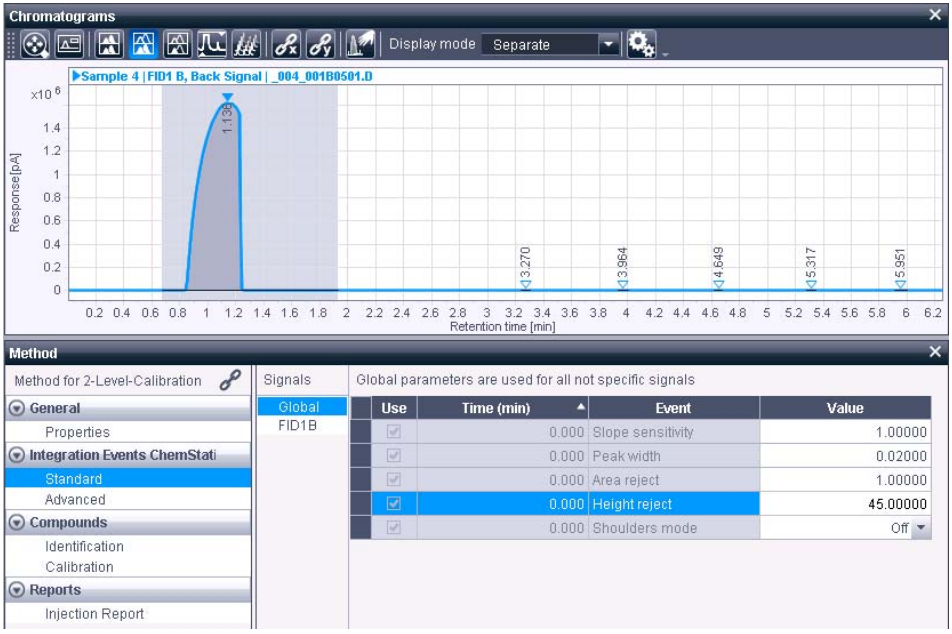


Figura 21 Amostra 1 após a edição dos eventos de integração

Para Editar Eventos de Integração Temporizados

Na **Sample 1-3** dos dados de exemplo, o final do pico solvente não está definido claramente (área cinzenta clara); consulte a figura seguinte.

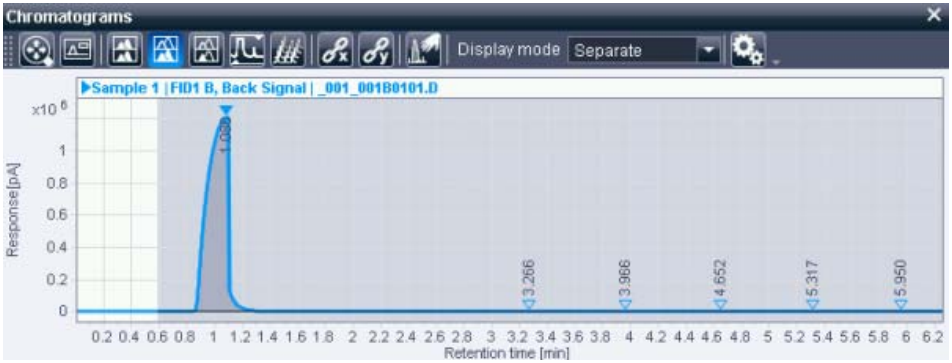


Figura 22 Amostra 1 dos dados de exemplo sem eventos temporizados

1. Para determinar o final de um intervalo de picos solvente, é possível adicionar dois eventos temporizados. Clique com o botão direito debaixo da tabela e selecione **Add integration event** no menu de contexto.

   Repita este passo para colocar duas novas filas na tabela **Integration Event**.
2. Em **Events**, selecione **Integration** na lista suspensa para ambas as linhas.
3. Em **Value**, defina **Off** para o primeiro novo evento de integração e **On** para o segundo novo evento.
4. No **Time [min]**, defina o tempo em que o pico solvente deve terminar (Integração desligada), por exemplo, **1.400**, e um tempo para voltar a ligar a integração, por exemplo, **1.800**.
5. Volte a processar os dados.

   O cromatograma deve agora ficar parecido com o da figura seguinte.

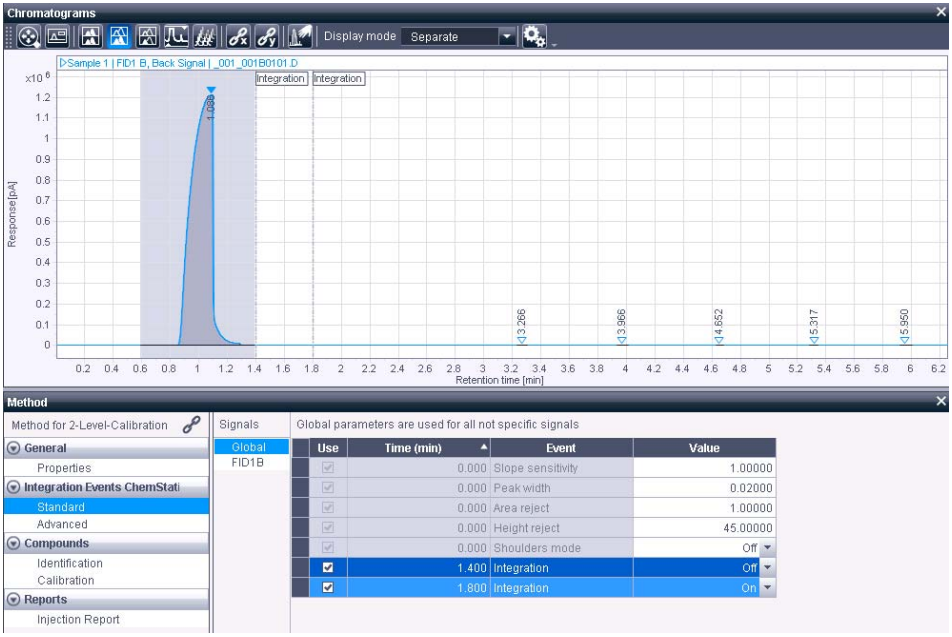


Figura 23 Amostra 1 dos dados de exemplo com eventos temporizados

Para Editar os Parâmetros de Identificação do Composto

Os compostos esperados são armazenados em uma tabela de composto como parte do método. O procedimento seguinte descreve como adicionar um ou mais picos do cromatograma como novos compostos à tabela de composto.

Preparações

Para ter uma visão melhor dos picos relevantes, ligue o ajuste de escala personalizado (consulte "Para Ligar/Desligar o Escalonamento Personalizado" na página 51).

Se somente receber uma visualização alargada não pretendida da linha de base após ligar o ajuste de escala personalizado, selecione a opção **Scale to fraction of nth largest peak** na janela **Chromatogram Properties** e efetue o ajuste da escala para o segundo maior pico.

1 Na janela **Method**, selecione a seção **Compounds** e o nó **Identification**.

É possível ver a **Compound Table** vazia dentro da janela de **Method**.

2 Na janela **Chromatograms**, selecione o pico ou os picos necessários correspondentes aos compostos que você deseja adicionar.

Para selecionar vários picos, mantenha pressionada a tecla **Ctrl** enquanto clica nos picos. Para selecionar um intervalo de picos, mantenha pressionada a tecla **Shift** enquanto clica nos picos.

3 Clique com o botão direito no pico selecionado e escolha **Add peak as compound to method** no menu de contexto. Se selecionou vários picos, o comando é **Add multiple peaks as compound to method**.

A informação correspondente é adicionada à tabela de composto do método selecionado. Por padrão, os parâmetros de composto são definidos da seguinte forma:

- **Type**: São usados ícones diferentes para os tipos de compostos:

  para um composto único

  para um grupo nomeado

  para um grupo temporizado
- **Name**: **peak@RT**
- **Signal**: o sinal a partir do qual selecionou o pico
- **Exp.RT**: o tempo de retenção do pico selecionado do cromatograma atual usado para construir a tabela de compostos

Para dados de exemplo, adicione todos os cinco picos como composto ao método fora o pico do solvente.

4 Digite um nome na coluna **Name** para cada pico relevante.

Para dados de exemplo, atribua um nome aos cinco picos de **Compound 1** a **Compound 5**.

Os nomes aparecem como anotações de pico para compostos esperados como na figura seguinte.

Figura 24 Compostos esperados

5 Selecione todas as amostras e volte a processar os dados.

Em cada amostra, todos os nomes de pico definidos aparecem junto dos tempos de retenção na janela **Chromatograms** como na figura seguinte.

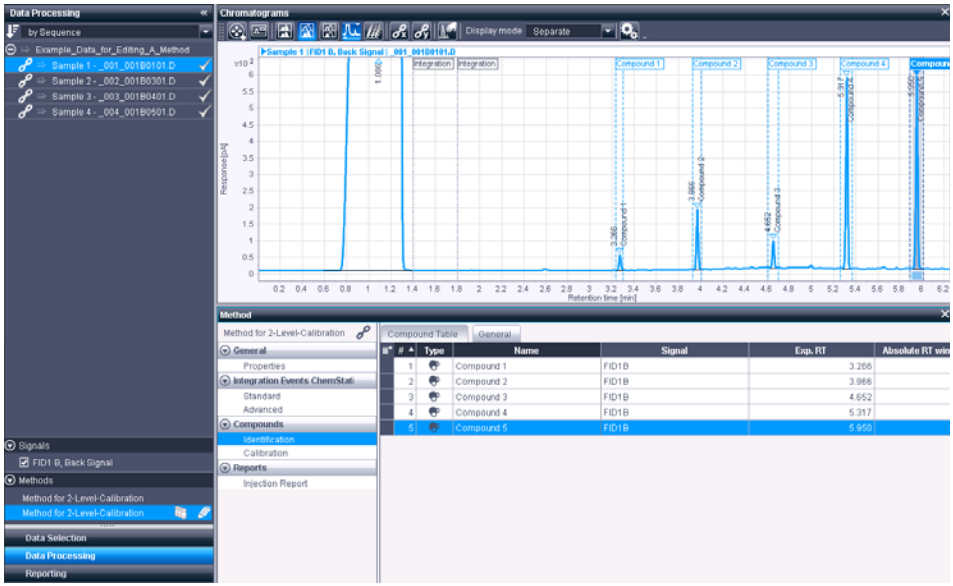


Figura 25 Identificação dos compostos

Para Editar os Parâmetros de Calibração

O procedimento seguinte descreve quais parâmetros definir para efetuar a calibração de um composto. Neste exemplo, o *Composto 5* é o pico mais alto dos dados de exemplo. As etapas seguintes também podem ser efetuadas com os Compostos de 1 a 4.

1 Na janela **Method**, selecione a seção **Compounds** e o nó **Calibration**.

O **Type** e o **Name** do composto foram aplicados à tabela de compostos de calibração.

2 Indique a **Amount unit**, por exemplo **mg**, dos dados de exemplo.

A unidade de quantidade é equivalente à designação do eixo X da curva de calibração.

3 Indique a **Concentration unit**, por exemplo **µg/mL** dos dados de exemplo.

A concentração será calculada após a calibração e será mostrada na janela **Injection Results**.

Para receber a concentração correta, os multiplicadores devem ser definidos na janela **Injection List** (consulte "Para Editar a Lista de Injeções" na página 63).

4 Escolha se a **Response** usada para calibrar e quantificar o composto é a **Area**, a **Height**, a **Area%** ou a **Height%**.

Para os dados de exemplo, escolha **Area**.

5 Para este exemplo, defina o **Mode** para **Curve** e o **Curve model** para **Linear**.

6 Na coluna **Origin**, é possível escolher entre quatro opções:

- **Ignore**: A origem não é usada. São necessários pelo menos dois pontos de calibração.
- **Include**: Um ponto virtual (0;0) é tido em conta para calcular a equação da curva de calibração. É necessário pelo menos um ponto de calibração.
- **Force**: A curva de calibração é forçada para a origem. A equação da curva é y = ax. É necessário pelo menos um ponto de calibração.
- **Connect**: A curva é conectada à origem por um segmento linear do ponto do nível de calibração mais baixo. São necessários pelo menos dois pontos de calibração.

Para os dados de exemplo, escolha **Ignore**.

7 Para os dados de exemplo, defina **1Multiplier**dos compostos.

Para detalhes sobre o cálculo, consulte o *Análise de dados Agilent OpenLAB – Guia de referência*.

8 Para uma calibração de nível 2, é necessário definir dois níveis para a calibração.

Para o Composto 5 dos dados de exemplo, defina **10** para o **Level 1** e **20** para o **Level 2**. Deixe os níveis 3 a 5 vazios.

Se deseja alterar o número de níveis, selecione a guia **General** e defina um número diferente na caixa de texto **Number of levels**. Para este exemplo, é possível desativar os níveis 3 a 5 e definir **2** para o **Number of levels**.

Para Editar a Lista de Injeções

O último passo para a calibração é definir os parâmetros de amostra se tal não tiver sido efetuado em ChemStation ou EZChrom.

1 Para visualizar a janela **Injection List**, selecione a **Injection List** no grupo da faixa de opções **Windows**.

2 Na janela **Injection List**, defina o tipo de amostra de cada injeção. Para uma calibração de nível 2, você necessita de dois padrões de calibração.

Para os dados de exemplo, defina o tipo de amostra **Cal. Std.** para as Amostras 1 e 2 e deixe **Sample** para as Amostras 3 e 4.

3 No **Run type** é possível deixar o espaço em branco, o que significa que o ponto de calibração ficará na curva de calibração após o reprocessamento. Ou é possível escolher entre **Clear all calibration** ou **Clear calibration at level** para remover determinados pontos de calibração.

Para os dados de exemplo, deixe o espaço em branco.

4 Em **Level**, defina que padrão de calibração fica igual a que nível que definiu nos parâmetros de calibração de seu método.

Para os dados de exemplo, defina os níveis **1** para a Amostra 1 e **2** para a Amostra 2.

5 No **Multiplier 1-5** e no **Dil. factor 1-5**, defina o valor correto para calcular a concentração de sua amostra.

Por exemplo, o solvente é de 100 mL. Quando 10 mg se encontram dissolvidos em 100 mL, para receber µg/mL deve multiplicar por 1000/100 = 10.

Para os dados de exemplo, defina **10** para o **Multiplier 1** nas Amostras 3 e 4.

Injection List

Ord. #	Inj. #	Name	Sample type	Run type	Level	Injection date	Modification date	Amount	ISTD Amt 1	ISTD Amt 2	ISTD Amt 3	ISTD Amt 4	ISTD Amt 5	Multiplier 1	Multi
1	1	Sample 1	Cal. Std.		1	02/14/2012 04:56 PM	09/06/2013 11:08...	0.000						1.00000	
2	1	Sample 2	Cal. Std.		2	02/14/2012 05:19 PM	09/06/2013 11:08...	0.000						1.00000	
3	1	Sample 3	Sample			02/14/2012 05:30 PM	09/06/2013 11:08...	0.000						10.00000	
4	1	Sample 4	Sample			02/14/2012 05:42 PM	09/06/2013 11:08...	0.000						10.00000	

Figura 26 Lista de injeções

6 Todas as colunas com um fundo cinzento exibem metadados que podem ser revisados mas não alterados, por exemplo, **Injection date** ou **Modification date**.

Para Revisar os Resultados de Calibração

Os resultados de injeção e a curva de calibração podem agora ser revisados.

1 Volte a processar todas as injeções.

Neste exemplo, os símbolos de aviso ainda são mostrados junto dos padrões de calibração (**Sample 1** e **Sample 2**) porque somente foi definida uma curva de calibração para o *Composto 5*. Os *Compostos 1 a 4* ainda não têm entradas. Também é possível repetir os procedimentos descritos anteriormente para estes compostos. Em seguida, após o reprocessamento, as marcas de verificação devem aparecer em vez dos símbolos de aviso.

2 Revise a janela **Injection Results**.

Poderá encontrar os resultados de **Amount** e **Concentration** de seus compostos configurados selecionando as amostras relevantes na árvore de injeção ou na janela **Injection List**.

Para o Composto 5 dos dados de exemplo, a quantidade da Amostra 3 é de **12.278 mg** e a concentração é de **122.780 µg/mL**. A quantidade da Amostra 4 é de **17.246 mg** e a concentração é de **172.457 µg/mL**.

3 Para revisar a curva de calibração de seus compostos esperados, clique em **Calibration Curve** no grupo da faixa de opções **Windows** ou selecione o layout **Compounds**.

4 Selecione suas amostras para revisar a curva de calibração correspondente na janela **Calibration Curve**.

Para o Composto 5 dos dados de exemplo, os resultados da Amostra 4 devem ser parecidos com a figura seguinte.

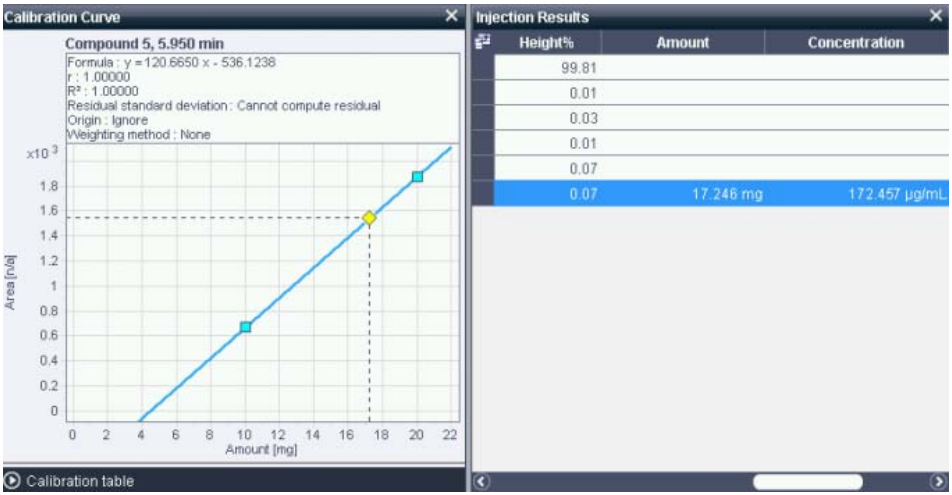


Figura 27 Resultados de calibração para o Composto 5 na Amostra 4 dos dados de exemplo

Na janela **Calibration Curve**, os quadrados azul claros são os dois níveis de calibração. O diamante amarelo é o composto da amostra selecionada.

A janela dos **Injection Results** mostra os resultados de **Amount** e da **Concentration** calculada.

Para Salvar Resultados e Métodos

1 Salve seus resultados (consulte "Para Salvar os Resultados" na página 48).

O método associado às injeções de seu conjunto de resultados será salvo automaticamente conjuntamente com os resultados.

2 Se quiser usar seu método editado para outros dados, pode atualizar o método principal.

a Clique em **Update Master Method**.

Uma caixa de diálogo será exibida. Se existir um método principal, serão exibidos os caminhos exatos do método principal e do método do conjunto de resultados. Se não existir método principal, será criado um novo.

b Clique em **Yes**.

Integração Manual

Esta seção descreve como pode alterar interativamente a integração de seu cromatograma usando a integração manual.

Normalmente a integração manual inclui os passos seguintes:

- Abra os dados e o método relevantes.
- Para a integração manual, os dados devem ser associados a um método.
- Exiba o cromatograma e faça zoom na área de interesse.
- Ative a integração manual.
- Mova o cursor do mouse sobre a área da linha de base onde deseja alterar a integração.
- Dependendo da posição do cursor do mouse, o sistema oferecerá a ferramenta de integração manual correspondente.
- Quando a ferramenta de integração manual necessária estiver ativa, use o mouse para desenhar uma nova linha de base ou arrastar um ponto existente da linha de base para uma nova posição.
- Os dados são reprocessados automaticamente. Um asterisco (*) é anexado ao nome do arquivo na árvore de injeção para indicar a integração manual.

Preparação de Dados e Métodos

1 Carregue os dados relevantes.

NOTA

Para reproduzir os exemplos descritos nas seções seguintes, carregue o conjunto de resultados **Example_Data_for_Manual_Integration**. Este conjunto de resultados é entregue como dados de exemplo com a Análise de dados OpenLAB.

2 Crie um novo método (consulte "Para Criar um Novo Método" na página 44) ou carregue um método existente. Para carregar um método:

   a Clique em **Open Method** no grupo da faixa de opções **Processing**.

   b Procure no diretório do conjunto de resultados (por exemplo, se você usar o ChemStation: C:\Chem32\1\Data\Example_Data_for_Manual_Integration) e selecione o método.

   c Clique em **Open**.

NOTA Para reproduzir os exemplos descritos nas seções seguintes, carregue o método **Manual_Integration.pmx**. Este método é entregue como parte dos dados de exemplo com a Análise de dados OpenLAB.

3 Associe o método aos dados (consulte "Para associar e reprocessar os dados" na página 46).

4 Exiba o cromatograma no layout **Chromatograms** e faça zoom na área de interesse.

Para dados de exemplo, faça zoom no tempo de retenção entre cerca de *7,0* e *9,0* mín., conforme exibido na figura seguinte.

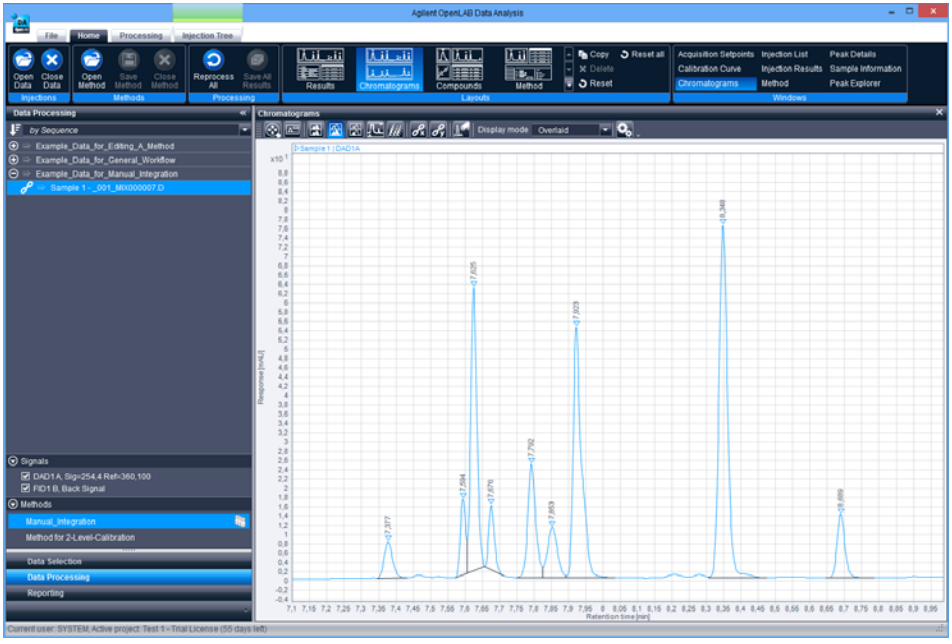


Figura 28 Preparação de dados para integração manual

Para Ativar ou Desativar Ferramentas

É possível ativar ou desativar as ferramentas de integração manual únicas. Por padrão, todas as ferramentas estão ativadas.

1 Para verificar quais ferramentas estão ativas, clique em na barra de ferramentas **Chromatograms**.

A caixa de diálogo **Chromatogram Properties** será exibida.

2 Selecione a página **Manual Integration**.

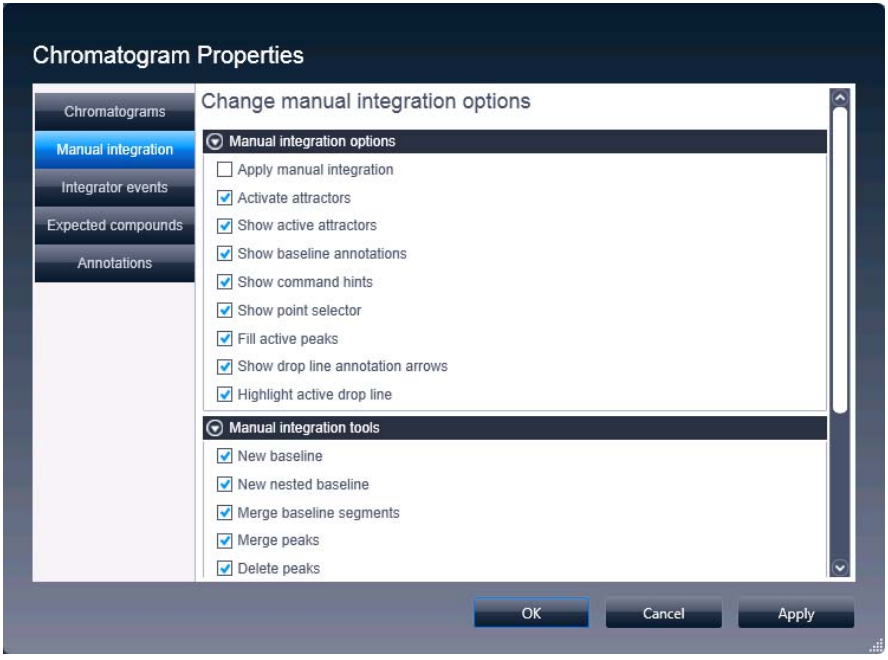


Figura 29 Página de **Manual integration** na caixa de diálogo **Chromatogram Properties**

Em **Manual integration options**, é possível definir o comportamento geral das ferramentas de Integração Manual. Por exemplo, é possível escolher se pretende usar atratores (consulte “Atratores” na página 69) ou se pretende ver dicas de comando ao usar as ferramentas.

Em **Manual integration tools** é possível ativar ou desativar cada ferramenta de Integração Manual única.

Para Ativar a Integração Manual

1 Clique no ícone de Integração Manual na barra de ferramentas **Chromatograms**.

Os ícones Desfazer e Refazer aparecem.

Atratores

Muitas das ferramentas de Integração Manual interagem com os chamados atratores. Os atratores são normalmente visíveis no sinal e nos pontos da linha de base dos elementos adjacentes. Eles são indicados por quatro setas pequenas. Quando o cursor se aproxima de um atrator, este se moverá automaticamente para o atrator. Isto permite posicionar novos elementos diretamente no sinal ou diretamente anexados aos segmentos da linha de base adjacentes.

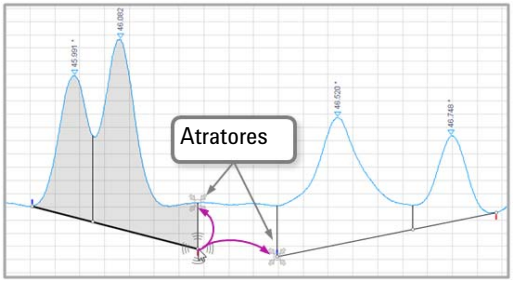


Figura 30 Exemplos de atratores ao mover um ponto da linha de base

Figura 31 Atrator ativo com cursor embutido

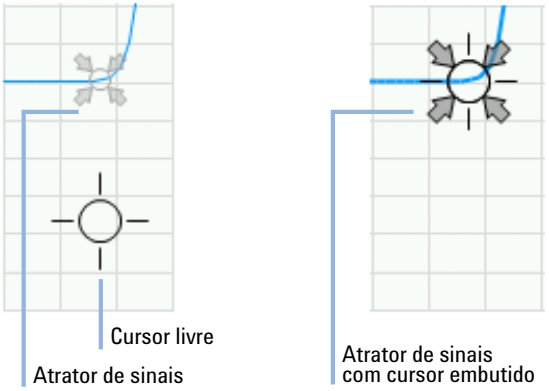


Figura 32 Exemplo de atrator quando cria uma nova linha de base

Roda de Integração

A integração manual permite a modificação dos pontos da linha de base de várias formas. Para clarificar as possibilidades, consulte a figura seguinte. O exemplo mostra o resultado de uma integração automática. Como pode ver, existem vários segmentos da linha de base. Alguns destes estão associados a um pico único, os outros contêm vários picos.

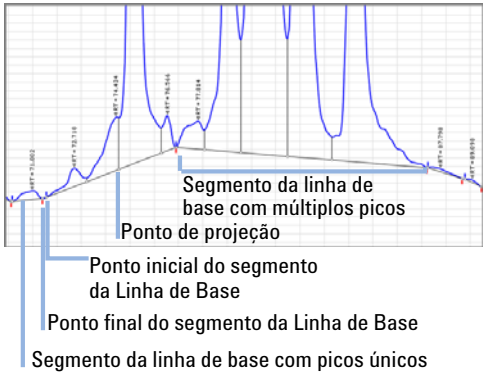

Segmento da linha de
base com múltiplos picos
Ponto de projeção
Ponto inicial do segmento
da Linha de Base
Ponto final do segmento da Linha de Base
Segmento da linha de base com picos únicos

Figura 33 Pontos da linha de base

Um ponto da linha de base pode fazer parte de um ou dois picos individuais ou de segmentos da linha de base. Dependendo do tipo de ponto da linha de base, existem várias opções relacionadas com o que fazer com este ponto da linha de base único:

- *Mover ponto da linha de base esquerdo*

  O ponto da linha de base é movido para que todo o segmento da linha de base esquerdo, incluindo todos os seus picos associados, seja modificado. O segmento da linha de base direito não é modificado por esta ação.

- *Mover ponto da linha de base direito*

  O ponto da linha de base é movido para que todo o segmento da linha de base direito, incluindo todos os seus picos associados, seja modificado. O segmento da linha de base esquerdo não é modificado por esta ação.

- *Mover ponto da linha de base comum*

  O ponto da linha de base é movido para que ambos os segmentos da linha de base e todos os seus picos associados sejam modificados.

- *Nova linha de base conectada*

  É criado um segmento da nova linha de base que começa diretamente no ponto da linha de base ativa. O ponto final do novo segmento pode ser posicionado livremente.

Para permitir a fácil seleção das opções possíveis, é usada a chamada *Roda de Integração*. A Roda de Integração aparece automaticamente quando você move o mouse perto de um ponto de inicial/final da linha de base ou do ponto de conexão de uma linha de projeção com um segmento da linha de base. A Roda de Integração consiste em vários segmentos coloridos. Cada um destes segmentos está associado a uma ação específica que é possível para o ponto da linha de base ativa. Por exemplo, a figura seguinte mostra a Roda de Integração do ponto da linha de base compartilhado por dois segmentos da linha de base.

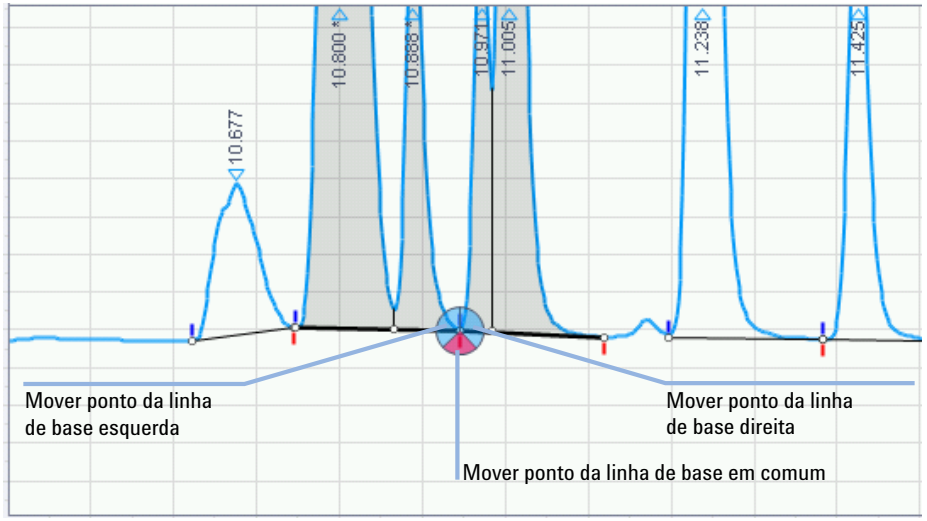
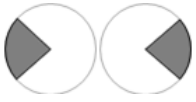


Figura 34 Roda de Integração para um ponto da linha de base comum

Neste exemplo específico, a Roda de Integração consiste em três segmentos – um para cada uma das três opções possíveis. As cores dos segmentos estão associadas à ação associada. As ferramentas seguintes podem ser oferecidas pela Roda de Integração:

Segmento	Ferramenta de Integração
	Mover ponto da linha de base Modifica todo o segmento da linha de base e todos os seus picos associados.
	Mover ponto da linha de base comum Modifica os dois segmentos da linha de base (esquerdo e direito) e todos os seus picos associados.
	*Nova linha de base conectada* Permite a criação de um novo segmento da linha de base que começa diretamente no ponto da linha de base.

Dependendo do tipo de ponto da linha de base (por exemplo, ponto final de um segmento da linha de base, ponto de projeção em um segmento da linha de base, etc.), as ferramentas de integração oferecidas na Roda de Integração variam. O sistema oferece automaticamente as ferramentas que são apropriadas para serem usadas para o ponto da linha de base selecionado.

Nova Linha de Base

A ferramenta **New Baseline** é automaticamente ativada quando você move o cursor do mouse para baixo do sinal em uma área onde não se encontra integrado qualquer pico. Neste caso, o cursor mudará para um símbolo de cruz.

Prérequisitos Para os dados de exemplo, faça zoom entre *7,3* e *7,5* min.

1 Mova o cursor do mouse para baixo do sinal em uma área onde não se encontra integrado qualquer pico.

   A ferramenta **New Baseline** é automaticamente ativada. O cursor muda para um símbolo de cruz.

2 Clique com o botão esquerdo do mouse e arraste a linha de base apresentada para uma nova posição.

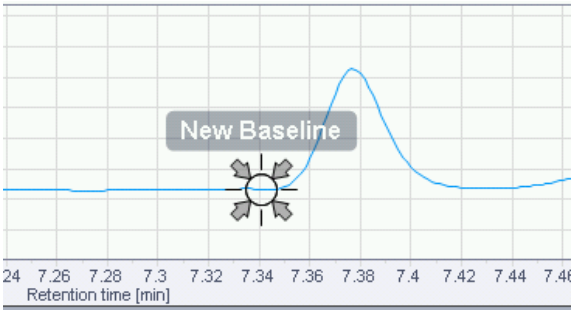


Figura 35 Ferramenta **New Baseline** com cursor embutido

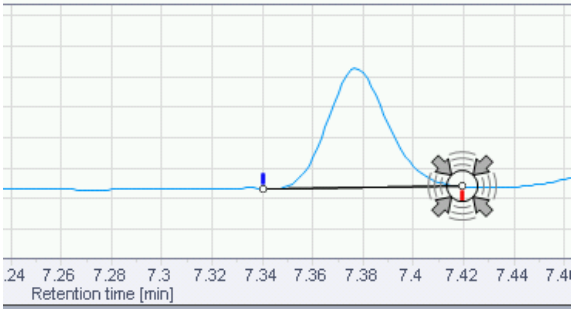


Figura 36 Atrator ativo com cursor embutido

O novo pico encontra-se agora integrado.

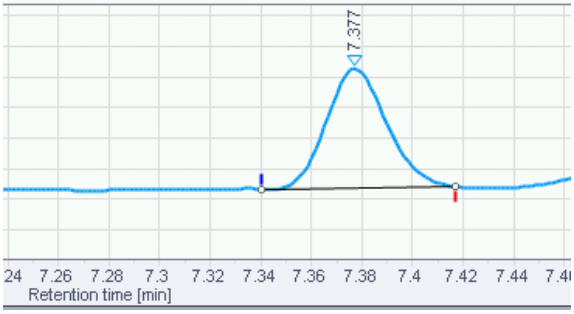


Figura 37 Novo pico integrado

O pico integrado é exibido com seu tempo de retenção.

NOTA

É possível construir livremente o segmento da nova linha de base em qualquer posição nas áreas que não contêm picos. Porém, é frequentemente exigido que o segmento da linha de base inicie ou termine diretamente no sinal. Para conseguir isto, é possível usar o *atrator de sinais* (consulte "Atratores" na página 69).

Nova Linha de Base Aninhada

Com a ferramenta **New Nested Baseline** é possível integrar picos ombro ou picos tangente. Os picos ombro e tangente estão sempre associados aos chamados segmentos da linha de base aninhada. Existem segmentos que estão definidos dentro de um pico principal. A ferramenta **New Nested Baseline** funciona da mesma forma que a ferramenta **New Baseline**, mas o intervalo de arrastamento está limitado à região do pico associado.

Prérequisitos Para os dados de exemplo, faça zoom entre *8,3* e *8,5* min.

1 Mova o cursor do mouse dentro de um pico, em um intervalo onde não estão definidos outros segmentos aninhados.

   A ferramenta **New Nested Baseline** é ativada. O intervalo de arrastamento é limitado pelo pico principal e pelos segmentos da linha de base aninhada já existentes.

2 Clique com o botão esquerdo do mouse e arraste a linha de base apresentada para uma nova posição.

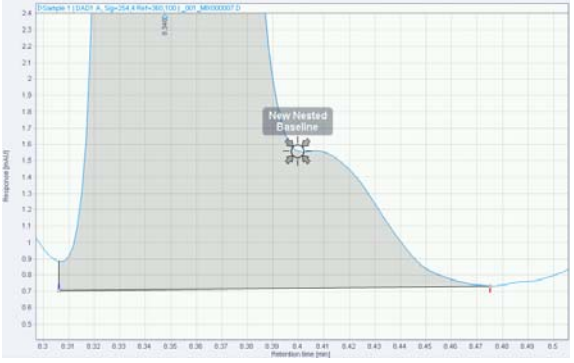


Figura 38 Ferramenta Nova **Nested Baseline** com cursor embutido

Figura 39 Definir o ponto final da nova linha de base aninhada

O novo pico tangente ou ombro encontra-se agora integrado.

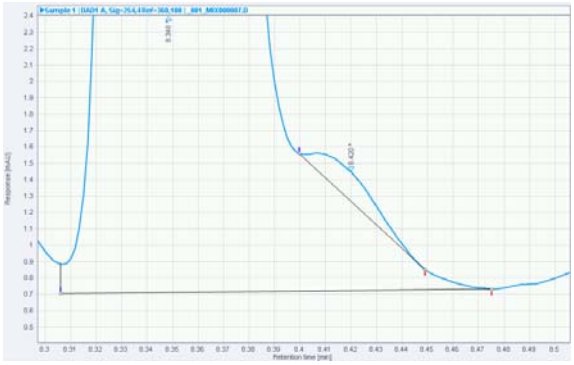


Figura 40 Novo pico tangente integrado

O pico tangente integrado é designado com seu tempo de retenção.

Unir Picos

Prérequisitos Para os dados de exemplo, faça zoom entre *7,7* e *8,0* min.

1 Mova o cursor do mouse para uma posição acima de uma linha de projeção.
A ferramenta **Merge Peaks** é ativada.

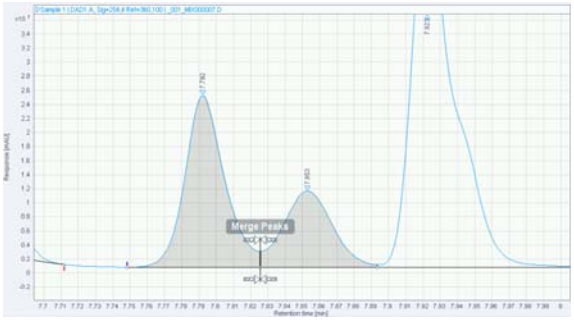


Figura 41 Ferramenta **Merge Peaks** ativada

2 Clique com o botão esquerdo do mouse para unir os picos realçados.

Dividir Picos

Prérequisitos Para os dados de exemplo, faça zoom entre *7.7* e *8.1* min.

1 Mova o cursor do mouse para cima do sinal de um pico integrado.

A ferramenta **Split Peaks** é apresentada.

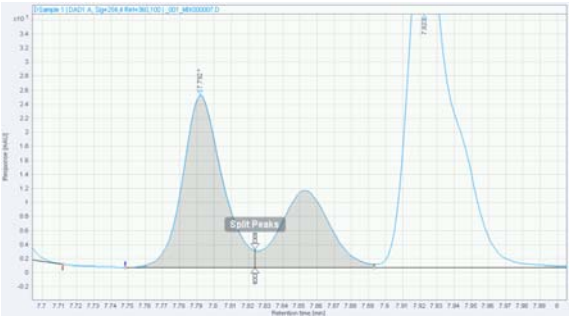


Figura 42 Ferramenta **Split Peaks** ativada

2 Clique com o botão esquerdo do mouse para dividir o pico na posição indicada pela linha de projeção.

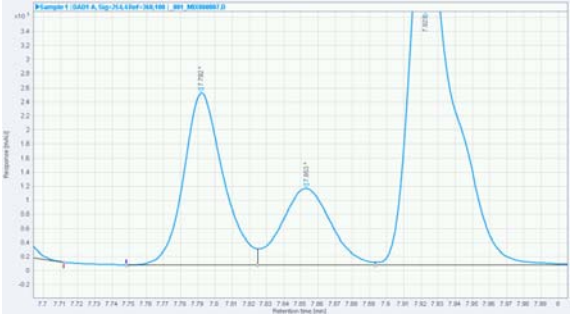


Figura 43 Pico dividido

Mover Ponto da Linha de Base

Este procedimento descreve a forma como é possível modificar um ponto da linha de base que indica a interseção de uma linha de projeção com a linha de base. O chamado *ponto de projeção* faz parte de um segmento da linha de base e não possui qualquer marcador azul ou vermelho. Se mover um ponto de projeção, o segmento da linha de base é dividido em duas partes.

Prérequisitos Para os dados de exemplo, faça zoom entre *7.7* e *8.1* min.

1 Mova o cursor do mouse para cima do ponto de projeção.

A Roda de Integração é apresentada somente com a ferramenta **Move Baseline Point** azul.

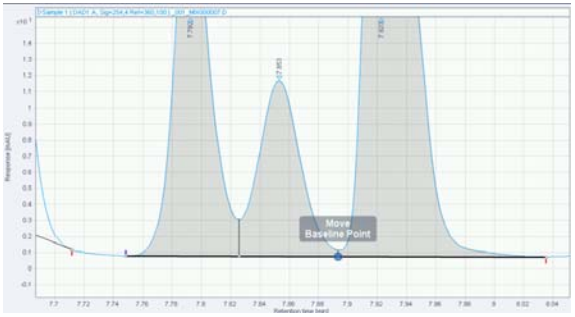


Figura 44 Ferramenta **Move baseline point**

2 Clique na Roda de Integração e mova o ponto da linha de base para sua nova posição.

O segmento da linha de base será dividido em duas partes. Cada segmento da linha de base possui um ponto inicial azul e um ponto final vermelho.

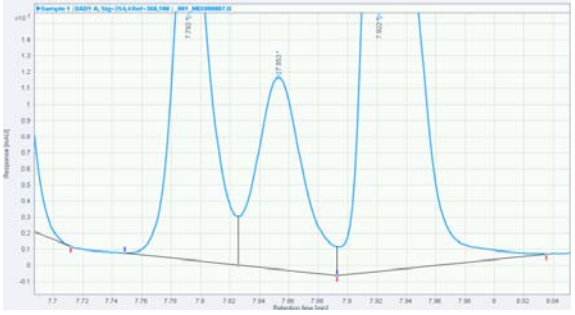


Figura 45 Mover um ponto da linha de base

Mover Ponto da Linha de Base Comum

Este procedimento descreve a forma como é possível modificar um ponto da linha de base que é compartilhado por dois segmentos da linha de base. Mover um ponto da linha de base comum afeta os segmentos da linha de base para a esquerda e para a direita do ponto da linha de base.

Prérequisitos Para os dados de exemplo, faça zoom entre *7.7* e *8.1* min.

1 Mova o cursor do mouse para cima do ponto da linha de base.

A Roda de Integração é exibida.

2 Mova o mouse sobre a seção vermelha da Roda de Integração.

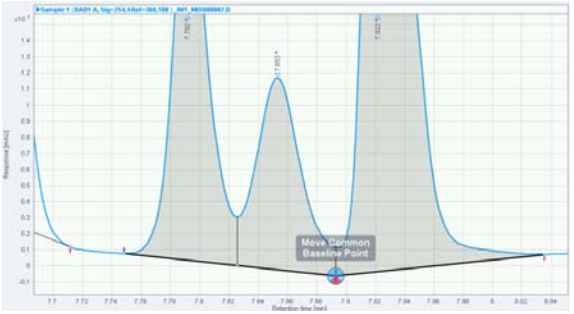


Figura 46 Roda de Integração com ferramenta **Move Common Baseline Point** realçada

3 Clique na seção vermelha e arraste o ponto da linha de base comum para sua nova posição.

Excluir Pico

1 Mova o cursor do mouse sobre a área de um pico integrado.

2 Clique com o botão direito na área do pico e selecione **Delete peak** no menu de contexto.

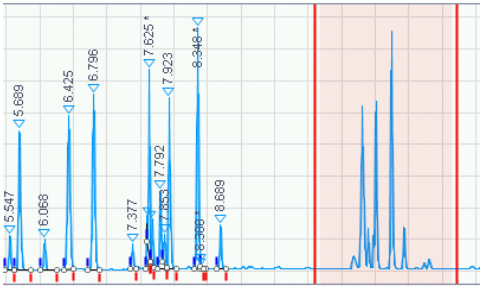
A linha de base para este pico é excluída e o pico não é mais integrado.

Excluir picos em um intervalo de tempo

1 Pressione e mantenha a tecla **Shift**.

2 Clique e arraste o mouse sobre o intervalo de tempo em que pretende excluir os picos.

Ao arrastar, o intervalo de tempo relevante é realçado em vermelho.



Para Limpar Correções

1 Para cancelar todas as integrações manuais, selecione **Clear corrections** na guia da faixa de opções **Processing**.

2 Processe seus dados.

Todas as integrações manualmente alteradas de seu cromatograma serão removidas.

Gerar um Relatório

Esta seção descreve como gerar um relatório automaticamente e manualmente. Se um relatório for gerado manualmente, é possível salvar o relatório para uma revisão posterior.

Para Gerar Relatórios Automaticamente

É possível configurar um método para que um relatório seja criado automaticamente após o reprocessamento de cada injeção.

NOTA

Ao processar novamente os dados, certifique-se de que a caixa de seleção **Create reports** na guia da faixa de opções **Processing** está selecionada.

Especialmente ao reprocessar um grande número de injeções, a geração automática de relatórios pode reduzir o desempenho do processamento. Nesse caso, se recomenda o uso da visualização **Reporting** para a geração de relatórios (consulte "Para Gerar um Relatório Manualmente" na página 84).

1. Se a janela **Method** estiver oculta, clique em **Method** na guia da faixa de opções **Home** para exibir a janela.
2. Em **Methods** no painel de navegação, selecione o método que deseja editar, por exemplo, o método **Method for 2-Level-Calibration**.

3 Na janela **Method**, selecione a seção **Reports** e, em seguida, o nó **Injection Report**, conforme exibido na figura seguinte.

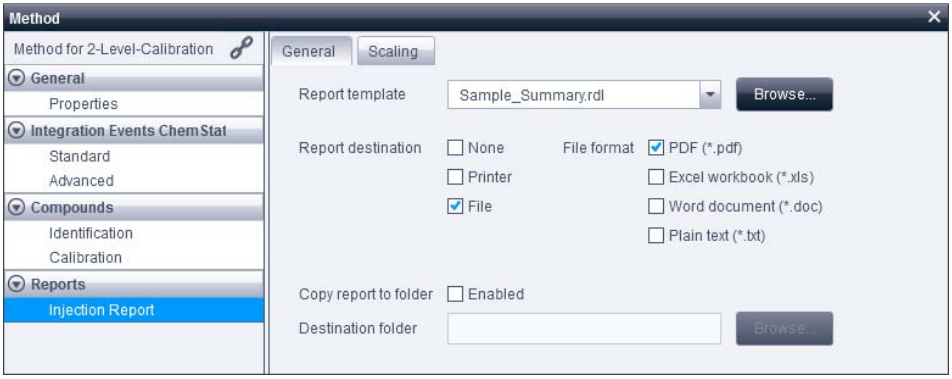


Figura 47 Gerar um relatório automaticamente

4 Selecione um dos modelos padrão da lista suspensa **Report template** ou clique em **Browse...** para selecionar um modelo específico de outro local.

5 Em **Report destination**, selecione **Printer**, **File** ou ambos.

É possível enviar os arquivos de relatório diretamente para impressora, salvá-los como um arquivo ou usar as duas opções ao mesmo tempo. Se salvar o relatório como um arquivo, selecione um formato de arquivo apropriado. Os arquivos de relatório serão salvos na pasta de arquivos de dados que corresponde aos dados de injeção.

6 Opcional: Para salvar cópias dos relatórios em um local adicional, selecione **Copy report to folder** e insira o nome de uma pasta em **Destination folder**.

7 Associe o método a um ou mais arquivos de dados.

Os arquivos de relatório são gerados automaticamente.

Para Gerar um Relatório Manualmente

1 Selecione a visualização **Reporting**.

2 Selecione os dados que deseja reportar.

a A seção **Injections** da árvore de navegação lista todas as injeções carregadas atualmente. Se desejar considerar outros dados: Carregue os arquivos de dados correspondentes (consulte "Carregar Dados" na página 36).

b Selecione os dados relevantes clicando nos nomes para que fiquem realçados ou marcando-os.

Por exemplo, selecione **Example_Data_for_General_Workflow**.

Se não selecionar quaisquer dados, o relatório será criado usando dados de demonstração.

3 Carregar um modelo de relatório.

a A seção **Report Templates** lista todos os modelos de relatório no diretório selecionado atualmente. Se for necessário, navegue até um diretório diferente.

Poderá encontrar um conjunto de modelos predefinidos nas seguintes localizações:

- Program Files\Agilent Technologies\OpenLAB Data Analysis\Bin\Reporting\IntelligentReporter\DefaultTemplates
- Program Files (x86)\Agilent Technologies\OpenLAB Data Analysis\Bin\Reporting\IntelligentReporter\DefaultTemplates
- No disco 7 dos DVDs de instalação: \Disk7\Report Templates\

b Clique duas vezes no modelo de relatório, por exemplo, SequenceSummary_Standard.rdl.

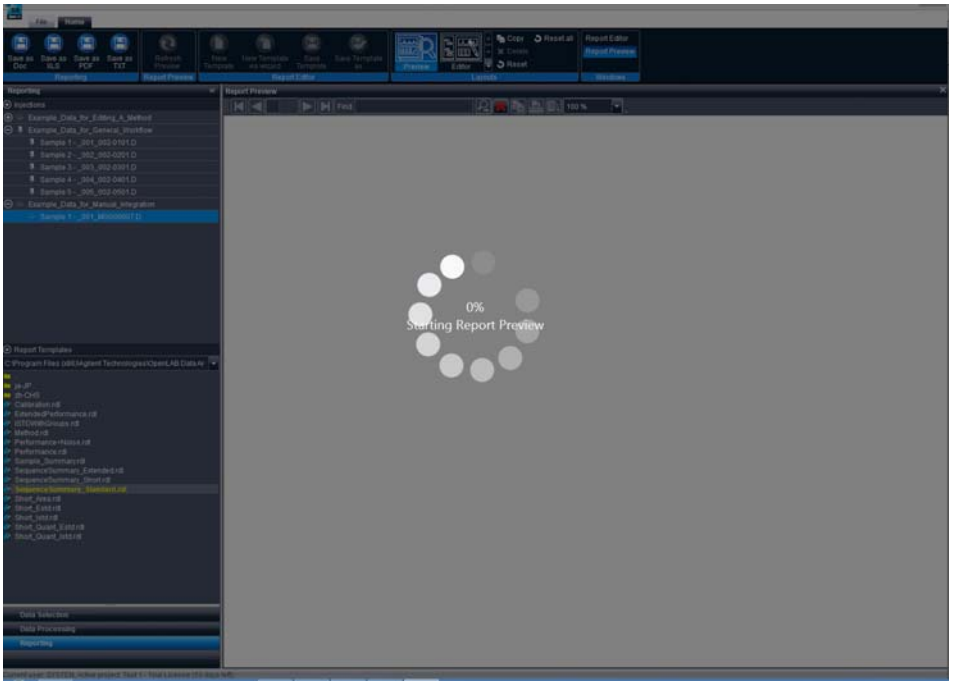


Figura 48 Gerar um relatório manualmente

Será criado um relatório com base no modelo de relatório selecionado e os dados selecionados. O modelo de relatório usado para criar o relatório é exibido.

NOTA

O relatório **Performance+Noise** somente funciona com dados processados pelo ChemStation ou pelo EZChrom. Ao reprocessar dados na Análise de dados OpenLAB, os parâmetros de desempenho de pico necessários não são calculados.

4 Se criou um relatório manualmente, é necessário salvar o relatório para uma revisão posterior.

a Na faixa de opções, clique em um dos botões Salvar que corresponda ao formato desejado. É possível escolher entre os formatos DOC, XLS, PDF ou TXT.

Uma caixa de diálogo **Save As** abre.

NOTA Os arquivos TXT não contêm imagens. Os cromatogramas, as curvas de calibração, os espectros e gráficos não estão disponíveis neste formato.

b Especifique o nome e o local do arquivo para o relatório e clique em **Save**.

5 Configuração para Uso Automático do OpenLAB CDS

Configurar o ChemStation para Processamento Automático com a Análise de Dados OpenLAB 88

Copiar o Arquivo de Macro do ChemStation 88

Editar o Método do ChemStation 88

Configurar o EZChrom para Processamento Automático com a Análise de Dados OpenLAB 90

É possível configurar o ChemStation ou o EZChrom para que possam usar a Análise de Dados OpenLAB por padrão. Este capítulo descreve a configuração necessária no ChemStation ou no EZChrom.

Configurar o ChemStation para Processamento Automático com a Análise de Dados OpenLAB

Os métodos do ChemStation contêm parâmetros de aquisição de dados e parâmetros de análise de dados. Em cada método do ChemStation, é possível chamar um método de processamento da Análise de Dados OpenLAB ao invés da Análise de Dados específica do ChemStation.

Copiar o Arquivo de Macro do ChemStation

Copie Disk7\CDS_Automatic_Processing\ChemStation\da_processing.mac para Chem32\Core.

Editar o Método do ChemStation

Repita estas etapas para cada Método do ChemStation. Poderá encontrar métodos de exemplo para o ChemStation no disco 7 nos caminhos seguintes:

- CDS_Automatic_Processing\ChemStation\Example_GC.M
- CDS_Automatic_Processing\ChemStation\Example_LC.M

Estes métodos já usam uma Lista de Verificação do Tempo de Execução conforme descrito abaixo, terá somente de ajustar o caminho para o arquivo .pmx. É possível usar estes métodos como um ponto inicial para desenvolver seu próprio método.

1 Carregue seu método do ChemStation.
   a Selecione **View > Method and Run Control**.
   b Selecione **Method > Load Method**.
   c Selecione o método a ser editado. (Os arquivos de método possuem a extensão .m.)
   d Clique em **OK**.
2 Selecione **Method > Run Time Checklist...**.

3 Selecione a caixa de seleção **Pre-Run Command / Macro** e insira a string seguinte no campo de entrada:

loadmacro "da_processing.mac"

4 Desmarque a caixa de seleção **Standard Data Analysis**.

A análise de dados padrão é realizada diretamente no ChemStation. Se usar um método de Análise de Dados OpenLAB, esta seção é irrelevante.

5 Make sure the **Customized Data Analysis Macro** check box is cleared as well.

6 Selecione a caixa de seleção **Post-Run Command / Macro** e insira a string seguinte no campo de entrada:

da_postrun "<.pmx file path>"

Por exemplo, se estiver trabalhando com o ChemStation, o caminho do arquivo terá a seguinte aparência:

da_postrun "C:\Chem32\1\Method\example.pmx"

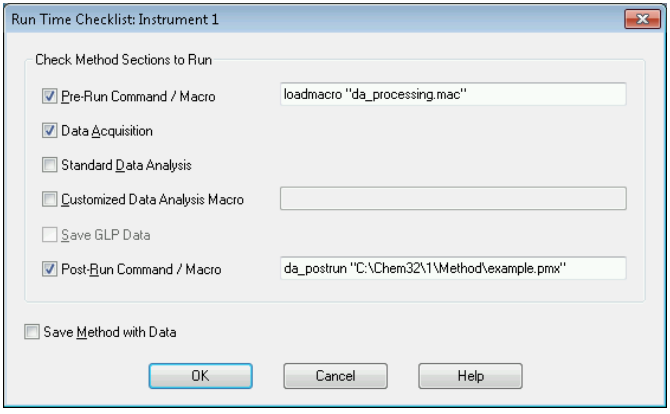


Figura 49 Lista de verificação do tempo de execução para usar um método de Análise de dados OpenLAB

7 Salve suas configurações.

Se usar este método no ChemStation, o método de Análise de Dados OpenLAB será usado automaticamente para analisar os dados.

Configurar o EZChrom para Processamento Automático com a Análise de Dados OpenLAB

Repita estas etapas para cada método do EZChrom.

1. Carregue seu método do EZChrom.
2. Clique em **Method > Advanced**.
3. Na caixa de diálogo **Advanced Method Options**, selecione a guia **Files**.
4. Selecione a caixa de seleção **After export**.
5. Clique no ícone Procurar e navegue até o arquivo iDAProcessing.exe ou insira o caminho e o nome do arquivo diretamente.

   Normalmente, este arquivo está localizado em C:\Program Files\Agilent Technologies\OpenLAB Data Analysis\Bin\iDAProcessing.exe.
6. Em **Additional parameters**, na seção **After export**, insira o caminho e o nome do arquivo do método de Análise de Dados OpenLAB necessário (.pmx file).

NOTA Coloque o caminho para o método entre aspas duplas (").

Por exemplo, se estiver trabalhando com o EZChrom, o caminho do arquivo terá a seguinte aparência:

""C:\Enterprise\Projects\Project1\Method\example.pmx""

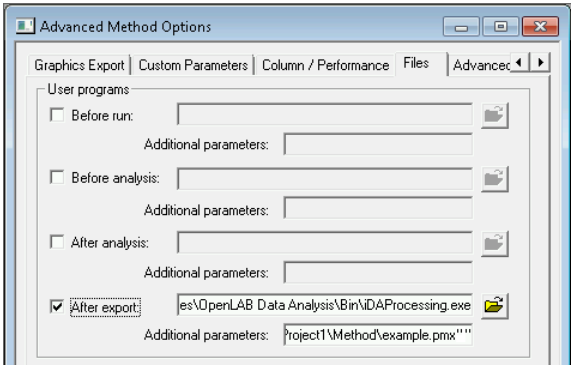


Figura 50 Opções de método avançado para usar um método de Análise de Dados OpenLAB

7 Salve suas configurações.

Se usar este método no EZChrom, a Análise de Dados OpenLAB será usada automaticamente para analisar os dados.

5 Configuração para Uso Automático do OpenLAB CDS

Configurar o EZChrom para Processamento Automático com a Análise de Dados OpenLAB

6
Apêndice

Caracteres Inválidos para Nomes de Arquivo ou Caminho 94
Desinstalação da Análise de Dados OpenLAB 95

Caracteres Inválidos para Nomes de Arquivo ou Caminho

A tabela seguinte lista os caracteres inválidos para os nomes de arquivo ou caminho no ChemStation e EZChrom. Estes nomes são usados, por exemplo, para armazenar dados, métodos ou modelos de relatório.

- X indica um caractere inválido.
- - indica um caractere válido.

Tabela 2 Caracteres inválidos

Caractere	ChemStation	EZChrom
< (menor que)	X	X
: (dois-pontos)	X	X
> (maior que)	X	X
" (aspas)	X	X
/ (barra)	X	X
\ (barra invertida)	X	X
| (barra ou pipe vertical)	X	X
? (ponto de interrogação)	X	X
* (asterisco)	X	X
; (ponto-e-vírgula)	X	-
& (E comercial)	X	-
' (aspas simples)	X	-
@ (arroba)	X	-
% (porcentagem)	X	-
Espaço em branco	X	-
[(colchete esquerdo)	X	-
[(colchete direito)	X	-
+ (mais)	X	-
. (ponto final)	X	-

Desinstalação da Análise de Dados OpenLAB

Se tiver instalado a Análise de Dados OpenLAB como um aplicativo autônomo, ou seja, se não tiver a Edição ChemStation ou EZChrom do OpenLAB CDS sendo executada em seu sistema, é possível desinstalar a Análise de Dados OpenLAB conforme descrito a seguir.

Se a Análise de Dados OpenLAB estiver sendo executada junto com o OpenLAB CDS, uma desinstalação do OpenLAB CDS removerá também a Análise de Dados OpenLAB. Para obter mais informações sobre a desinstalação do OpenLAB CDS, consulte o manual de instalação do OpenLAB CDS.

1 No Instalador Principal, selecione **Maintenance** no menu da barra lateral.

2 Selecione **OpenLAB Uninstallation**.

Será exibido um assistente de desinstalação.

3 Na tela **Shared Components**: Se quaisquer outros produtos Agilent estiverem instalados, desmarque a caixa de seleção **Uninstall Software Verification**.

4 Clique em **Next**.

Na tela **Summary** existe uma lista dos componentes que deseja desinstalar.

5 Selecione **Start** para iniciar a desinstalação.

Se quiser cancelar a desinstalação, selecione **Cancel**. Se quiser alterar as configurações, selecione **Back**.

Todos os componentes listados serão desinstalados automaticamente, um após o outro.

6 Quando a desinstalação estiver concluída, clique em **Finish** para fechar o assistente de desinstalação.

Glossário de UI

1

1.400
    1400
1.7
    1,7
1.800
    1800
12.278 mg
    12,278 mg
122.780 µg/mL
    122,780 µg/mL
17.246 mg
    17,246 mg
172.457 µg/mL
    172,457 µg/mL

4

45.0
    45,0

A

Add integration event
    Adicionar evento de integração
Add multiple peaks as compound to method
    Adicionar vários picos como composto ao método
Add peak as compound to method
    Adicionar pico como composto ao método
Additional items
    Itens adicionais
Additional Items
    Itens adicionais
Additional parameters
    Parâmetros adicionais
Advanced
    Avançado
Advanced Method Options
    Opções de Método Avançado
After export
    Após exportação
Amount
    Quantidade
Amount unit
    Unidade de quantidade
Area
    Área
Area reject
    Rejeição de área
Area%
    % de Área

B

Back
    Voltar
Browse
    Procurar
Browse...
    Procurar...

C

Cal. Std.
    Pdr. Cal.
Calibration
    Calibração
Calibration Curve
    Curva de Calibração
Cancel
    Cancelar
ChemStation integrator
    Integrador ChemStation
Chromatogram Properties
    Propriedades do cromatograma
Chromatograms
    Cromatogramas
Clear all calibration
    Limpar toda calibração
Clear calibration at level
    Limpar calibração ao nível
Clear corrections
    Limpar correções
Close Data
    Fechar Dados
Close Method
    Fechar Método
Compound 1
    Composto 1
Compound 5
    Composto 5
Compound Table
    Tabela de Compostos
Compounds
    Compostos
Concentration
    Concentração
Concentration unit
    Unidade de concentração
Connect
    Conectar
Connection succeeded
    Conexão bem-sucedida

Copy
Copiar
Copy report to folder
Copiar relatório para a pasta
Create
Criar
Create Desktop Shortcut
Criar Atalho na Área de Trabalho
Create Project
Criar Projeto
Create Projects for ChemStation Instruments
Criar Projetos para Instrumentos do ChemStation
Create reports
Criar relatórios
Curve
Curvo
Curve model
Modelo de curva

D

Data path
Caminho de dados
Data Processing
Processamento de Dados
Data Selection
Seleção de Dados
Delete peak
Excluir pico
Description
Descrição
Destination folder
Pasta de destino
Dil. factor 1-5
Fator de dil. 1-5

E

Edit
Editar
Enterprise path
Caminho corporativo
Events
Eventos
Example_Data_for_Editing_a_Method
Example_Data_for_General_Workflow

F

File
Arquivo
Files
Arquivos
Finish
Concluir
Force
Forçar

G

General
Geral

H

Height
Altura
Height reject
Rejeição altura
Height%
% de Altura

I

I agree with the terms and conditions
Concordo com os termos e condições
Identification
Identificação
Ignore
Ignorar
Ignore n largest peaks
Ignorar n maiores picos
Include
Incluir
Info
Informações
Injection date
Data de injeção
Injection List
Lista de Injeções
Injection Report
Relatório de Injeção
Injection Results
Resultados de Injeção
Injections
Injeções
Installation
Instalação
Installation Folder
Pasta da instalação
Installed Features
Recursos Instalados
Integration
Integração
Integration Event
Evento de Integração
Integration Events
Eventos de Integração

L

Level
Nível
Level 1
Nível 1
Level 2
Nível 2

License Agreement
Acordo de Licença
Link selected injections to selected method
Associar injeções selecionadas ao método selecionado
Load Data
Carregar Dados

M

Maintenance
Manutenção
Manual integration
Integração manual
Manual Integration
Integração Manual
Manual integration options
Opções de integração manual
Manual integration tools
Ferramentas de integração manual
Master Installer
Instalador principal
Merge Peaks
Unir Picos
Method
Método
Method path
Caminho do método
Methods
Métodos
Mode
Modo
Modification date
Data de modificação
Move baseline point
Mover ponto da linha de base
Move Baseline Point
Mover Ponto da Linha de Base
Move Common Baseline Point
Mover Ponto da Linha de Base Comum
Multiplier
Multiplicador
Multiplier 1
Multiplicador 1
Multiplier 1-5
Multiplicador 1-5

N

Name
Nome
Nested Baseline
Linha de Base Aninhada
Networked Workstation
Estação de trabalho em rede
New Baseline
Nova Linha de Base
New Method
Novo Método
New Nested Baseline
Nova Linha de Base Aninhada
Next
Avançar
Number of levels
Número de níveis

O

Off
Desligado
On
Ligado
Open
Abrir
Open Method
Abrir método
OpenLAB Data Analysis
Análise de dados OpenLAB
OpenLAB Data Analysis Installation Wizard
Assistente de instalação da Análise de Dados OpenLAB
OpenLAB Shared Services Settings for Registration
Configurações para registro dos serviços compartilhados OpenLAB
OpenLAB Uninstallation
Desinstalação do OpenLAB
Origin
Origem

P

Peak width
Largura de pico
Performance+Noise
Desempenho+Ruído
Post-Run Command / Macro
Comando/Macro de Pré-execução
Pre-Run Command / Macro
Comando/Macro de Pré-execução
Printer
Impressora
Processing
Processamento
Project folder path
Caminho da pasta do projeto
Projects
Projetos
Projects and Groups
Projetos e Grupos

R

Report destination
Destino de relatório
Report template
Modelo de relatório
Report Templates
Modelos de relatório
Reporting
Relatório

Reports
Relatórios
Reprocess Selected
Reprocessar selecionados
Reprocess selected injections
Reprocessar injeções selecionadas
Reset
Reinicializar
Reset all
Reinicializar todos
Resources
Recursos
Response
Resposta
Results
Resultados
Results1
Resultados1
Run Software Verification
Executar verificação de software
Run type
Tipo de corrida

S

Sample
Amostra
Sample 1
Amostra 1
Sample 1-3
Amostra 1-3
Sample 2
Amostra 2
Sample Information
Informações da Amostra
Save
Salvar
Save All Results
Salvar Todos os Resultados
Save As
Salvar Como
Save Method
Salvar Método
Save Method As
Salvar Método Como
Scale to baseline (i.e. ignore all identified peaks)
Ajustar a escala para linha de base (i.e., ignorar todos os picos identificados)
Scale to fraction of nth largest peak
Fração da escala do do enésimo maior pico
Server name
Nome do servidor
Shared Components
Componentes compartilhados
Signal
Sinal
Signal selection
Seleção de sinal
Slope sensitivity
Sensibilidade de inclinação
Split Peaks
Dividir Picos
Standard
Padrão
Standard Data Analysis
Análise de Dados Padrão
Start
Iniciar
Start Data Analysis
Iniciar análise de dados
Summary
Resumo

T

Template path
Caminho do modelo
Test Connection ...
Testar conexão...
Test Connection...
Testar conexão...
Time [min]
Tempo [min]
Type
Tipo

U

Uninstall Software Verification
Desinstalar verificação de software
Update Master Method
Atualizar método principal

V

Value
Valor

W

Windows
Janelas

Y

Yes
Sim

www.agilent.com

Neste Livro

Este guia descreve a instalação da Análise de Dados OpenLAB, as etapas de configuração necessárias e os fluxos de trabalho principais.

- Introdução
- Instalação
- Configuração do Painel de Controle do OpenLAB
- Trabalhar com a Análise de Dados OpenLAB
- Configuração para Uso Automático do OpenLAB CDS
- Apêndice

© Agilent Technologies 2012, 2013

Printed in Germany
10/2013

M8370-99001

Agilent Technologies